



دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده مهندسی معدن نفت و ژئوفیزیک

گروه اکتشاف، نفت و ژئوفیزیک

پایان نامه جهت اخذ مدرک کارشناسی ارشد

**کاربرد دینامیک سیالات محاسباتی در مدل سازی  
فرآیندهای حاکم بر انتقال و تحول آلاینده های فلزی ناشی از  
تولید زهاب اسیدی در معدن مس سرچشمه**

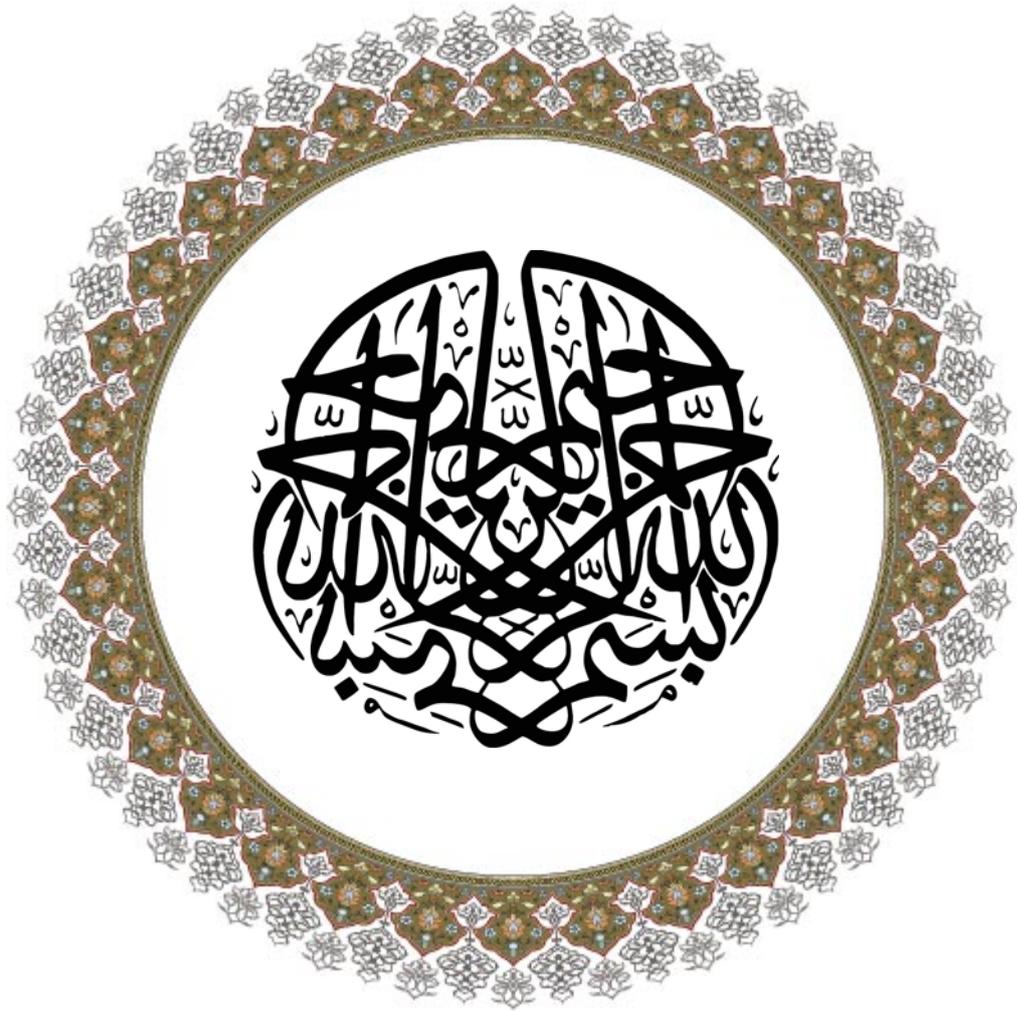
کیومرث سیف پناهی شعبانی

استاد راهنما

دکتر فرامرز دولتی ارده جانی

استاد مشاور

دکتر مجید انصاری جعفری



این اثر کوچک را تقدیم می‌کنم به

پدر و مادر مهربان و خانواده عزیزم

## تشر و قدردانی

با تشر از خداوند متعال، لازم می‌دانم از استاد گرانقدرم آقای دکتر دولتی که با راهنمایی‌های ارزنده‌شان مرا در انجام این پایان‌نامه راهنمایی کرده‌اند تشر کنم. همچنین از اساتید محترم دانشکده مهندسی معدن، نفت و ژئوفیزیک سپاسگذاری می‌کنم. در پایان نیز از آقای دکتر انصاری به دلیل مشاوره‌های سودمندشان متشکرم.

کیومرث سیف‌پناهی

اینجانب کیومرث سیف‌پناهی شعبانی تأیید می‌نمایم که مطالب مندرج در این پایان‌نامه نتیجه تحقیقات خودم می‌باشد و در صورت استفاده از نتایج دیگران مرجع آن را ذکر نموده‌ام.

کلیه حقوق مادی مرتبط با نتایج مطالعات، آزمایشات و نوآوری ناشی از تحقیق موضوع این پایان‌نامه متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می‌باشد.

ماه و سال

## مقالاتی که تاکنون از این پایان نامه استخراج شده‌اند:

\* مدل‌سازی انتقال آلاینده‌های فلزی در رودخانه‌های متأثر از زهاب اسیدی معادن با استفاده از روش حجم‌های محدود (کیومرث سیف پناهی شعبانی، فرامرز دولتی ارده جانی)  
مجله علمی پژوهشی مهندسی معدن، تحت داوری.

\*\* مدل‌سازی عددی جذب بیولوژیکی فلزات مس و منگنز توسط بیومس قارچی آسپرژیلوس نایجر از زهاب اسیدی معدن مس سرچشمه (کیومرث سیف پناهی، فرامرز دولتی ارده جانی، رضا مرنندی، هانیه سلیمانی‌فر)

چهارمین همایش و نمایشگاه تخصصی مهندسی محیط زیست، ۱۰ و ۱۱ آبان ماه ۸۹، دانشگاه تهران، دانشکده محیط زیست، شماره مقاله: ۱۱۲۸۹.

## چکیده

امروزه زهاب اسیدی معدن (AMD) را می‌توان بدترین مشکل زیست‌محیطی ناشی از فعالیت‌های معدنی به حساب آورد. معدن مس پورفیری سرچشمه یکی از معادن بزرگ پورفیری است که باعث ایجاد مشکلات زیست‌محیطی زیادی شده است. روش‌های عددی به عنوان ابزاری مناسب جهت کمک به حل بسیاری از مشکلات زیست‌محیطی به کار می‌روند. در این میان، روش حجم‌های محدود یک تکنیک عددی مناسب برای مدل‌سازی مسائل انتقال جرم و انتقال حرارت است که به صورت گسترده در مطالعات زیست‌محیطی به کار گرفته می‌شود. هدف از مطالعه حاضر، مدل‌سازی انتقال آلاینده‌های فلزی در رودخانه شور، معدن مس سرچشمه است. برای این منظور، از نرم افزار PHOENICS استفاده شد. در همین راستا، ابتدا جهت کالیبراسیون مدل عددی دو مسئله به صورت جداگانه مورد مدل‌سازی قرار گرفت. مسئله اول مربوط به مدل‌سازی انتقال یک آلاینده فلزی در یک رودخانه فرضی و مسئله دوم مربوط به مدل‌سازی فرآیند جذب بیولوژیکی فلزات مس و منگنز از زهاب اسیدی معدن مس سرچشمه در یک رآکتور پیوسته بود. پس از اتمام مرحله کالیبراسیون، انتقال آلاینده‌های فلزی در ارتباط با زهاب اسیدی در رودخانه شور با در نظر گرفتن کلیه مکانیسم‌های مؤثر بر انتقال مورد بررسی قرار گرفت. نتایج این بررسی نشان داد که فرآیند جذب عامل اصلی در حذف آلاینده‌ها از آب رودخانه می‌باشد. این فرآیند از ایزوترم غیرخطی لانگمویر تبعیت می‌کند. اعمال واکنش‌های مربوط به اکسایش آهن دو ظرفیتی و هیدرولیز آهن سه ظرفیتی تطابق بهتری را بین داده‌های صحرائی و پیش‌بینی مدل فراهم نمود. نتایج حاصل از این مدل‌سازی می‌تواند در توسعه برنامه‌های مدیریت زیست‌محیطی جهت پایش آلودگی آب رودخانه‌ها و درک بهتر مکانیسم‌های حاکم بر انتقال آلاینده‌ها مؤثر واقع گردد.

کلمات کلیدی: زهاب اسیدی معدن، مدل‌سازی عددی، حجم‌های محدود، جذب، انتقال آلودگی، معدن مس سرچشمه

## فهرست مطالب

د	فهرست جداول .....
ه	فهرست اشکال .....

### فصل اول: مقدمه

۲	۱-۱- مقدمه .....
۴	۲-۱- تأثیر فعالیت‌های معدنی بر کیفیت آب‌ها .....
۵	۳-۱- زهاب اسیدی معدن .....
۶	۴-۱- ضرورت انجام تحقیق حاضر .....
۹	۵-۱- مروری بر کارهای انجام شده .....
۱۵	۶-۱- اهداف پایان‌نامه .....
۱۵	۷-۱- فصل‌بندی پایان‌نامه .....

### فصل دوم: بررسی فرآیندهای حاکم بر انتقال آلاینده‌های فلزی

۱۸	۱-۲- مدل‌سازی .....
۱۸	۱-۱-۲- مدل مفهومی .....
۱۹	۲-۱-۲- مدل فیزیکی و مدل آنالوگ-الکتریک .....
۲۰	۳-۱-۲- مدل ریاضی .....
۲۰	۴-۱-۲- مدل عددی .....
۲۱	۵-۱-۲- مدل کامپیوتری .....
۲۲	۲-۲- فرآیندهای حاکم بر انتقال آلاینده‌ها .....
۲۵	۱-۲-۲- پهنرفت .....
۲۷	۲-۲-۲- پراکندگی .....
۲۸	۳-۲-۲- فرآیندهای رقیق‌سازی آلاینده .....
۲۹	۴-۲-۲- پراکندگی هیدرودینامیکی .....
۳۰	۳-۲- آلاینده‌های فلزی .....
۳۱	۴-۲- مکانیسم‌های انتقال آلاینده‌های فلزی در محیط آبی .....

### فصل سوم: روش عددی حجم‌های محدود و مدل‌سازی با

#### نرم‌افزار PHOENICS

۳۳	۱-۳- مقدمه .....
----	------------------

۳۶	..... PHOENICS در نرم افزار اصلی های عملیات های در نرم افزار PHOENICS ۱-۲-۳
۳۷	..... PHOENICS در تعریف مسأله در PHOENICS ۲-۲-۳
۴۰	..... PHOENICS بر نرم افزار PHOENICS معادله حاکم بر نرم افزار PHOENICS ۳-۲-۳
۴۱	..... PHOENICS در محیط نرم افزار PHOENICS اعمال شرایط مرزی و عبارات های تولید در محیط نرم افزار PHOENICS ۳-۳
۴۱	..... منابع های میدان شرایط داخلی، مرزی و منابع های میدان ۱-۳-۳
۴۱	..... PHOENICS در رفتار شرایط مرزی در PHOENICS ۲-۳-۳
۴۲	..... معادلات جبری ۳-۳-۳
۴۳	..... ترم یا عبارت منبع ۴-۳-۳
۴۵	..... اعمال و تنظیم شرایط مرزی ۵-۳-۳
۴۵	..... شرط مرزی مقدار ثابت ۱-۵-۳-۳
۴۷	..... شرط مرزی جریان ثابت / منبع ثابت ۲-۵-۳-۳
۴۸	..... شرط مرزی خطی ۳-۵-۳-۳
۴۸	..... شرط مرزی غیر خطی ۴-۵-۳-۳
۴۹	..... شرط مرزی ورودی ۵-۵-۳-۳
۵۰	..... شرط مرزی فشار ثابت ۶-۵-۳-۳
۵۱	..... USER - SET های منبع ۷-۵-۳-۳
۵۱	..... پیاده سازی شرایط مرزی ۸-۵-۳-۳
۵۱	..... غیرخطی بودن ۹-۵-۳-۳
۵۳	..... Q1 در فایل ۱۰-۵-۳-۳

## فصل چهارم: کالیبراسیون مدل عددی حجم های محدود انتقال آلاینده های فلزی

۵۵	..... مقدمه ۱-۴
	..... مدل سازی انتقال آلاینده های فلزی در رودخانه های متأثر از زهاب اسیدی معدن با استفاده از نرم افزار MATLAB ۵۷
۵۸	..... ۱-۲-۴ معادله حاکم بر انتقال آلاینده و گسسته سازی آن در حالت یک بعدی
۶۱	..... ۳-۴ مدل سازی یک بعدی در حالت لحظه ای و پیوسته و اعتبارسنجی مدل
۶۱	..... ۱-۳-۴ مدل سازی در حالت پیوسته بودن منبع آلودگی
۶۲	..... ۲-۳-۴ مدل سازی در حالت آنی یا گسسته بودن منبع آلودگی
۶۴	..... ۴-۴ مدل سازی دوبعدی

- ۶۵ ..... ۴-۴-۱- مدل سازی در حالت پیوسته بودن منبع آلودگی
- ۶۶ ..... ۴-۴-۲- مدل سازی در حالت گسسته یا آنی بودن منبع آلودگی
- ۷۱ ..... ۴-۵- مدل سازی فرآیند جذب بیولوژیکی فلزات مس و منگنز در زهاب اسیدی معدن مس سرچشمه در یک رآکتور پیوسته
- ۷۳ ..... ۴-۶- مدل سازی رآکتور پیوسته
- ۷۴ ..... ۴-۷- بررسی رفتار رآکتور در حالات مختلف جذب یون های فلزی از زهاب
- ۷۴ ..... ۴-۷-۱- مدل سازی در حالت بدون فرآیند جذب
- ۷۶ ..... ۴-۷-۲- مدل سازی در حالت فرآیند جذب خطی
- ۷۹ ..... ۴-۷-۳- مدل سازی با اعمال ایزوترم جذب غیرخطی لانگمویر
- ۸۳ ..... ۴-۷-۴- سینتیک جذب غیرخطی یون- نلسون
- ۸۶ ..... ۴-۸- آنالیز حساسیت
- ۸۷ ..... ۴-۸-۱- آنالیز حساسیت بر روی پارامترهای ایزوترم جذب غیر خطی مدل لانگمویر
- ۸۹ ..... ۴-۸-۲- آنالیز حساسیت بر روی پارامترهای سینتیک جذب غیرخطی مدل یون- نلسون
- ۹۰ ..... ۴-۸-۳- آنالیز حساسیت طول رآکتور یا بررسی تغییر طول رآکتور بر میزان جذب

## فصل پنجم: مدل سازی عددی انتقال آلاینده های فلزی ناشی از

### تولید زهاب اسیدی در رودخانه شور، معدن مس سرچشمه - پیش بینی مدل

- ۹۳ ..... ۵-۱- مقدمه
- ۹۳ ..... ۵-۲- مشخصات عمومی معدن مس سرچشمه
- ۹۳ ..... ۵-۲-۱- موقعیت جغرافیایی و شرایط اقلیمی کانسار مس پورفیری سرچشمه
- ۹۵ ..... ۵-۲-۲- تاریخچه معدن مس سرچشمه
- ۹۷ ..... ۵-۳- واحدهای مختلف تولیدی مجتمع مس سرچشمه
- ۹۷ ..... ۵-۳-۱- واحد معدن
- ۹۷ ..... ۵-۳-۲- واحد پرعیارکنی (تغلیظ)
- ۹۸ ..... ۵-۳-۳- واحد ذوب
- ۹۸ ..... ۵-۳-۴- واحد پالایشگاه
- ۹۹ ..... ۵-۴- زمین شناسی عمومی ناحیه معدن مس سرچشمه
- ۱۰۲ ..... ۵-۵- کانی سازی در معدن مس سرچشمه
- ۱۰۲ ..... ۵-۵-۱- منطقه شسته شده
- ۱۰۳ ..... ۵-۵-۲- منطقه اکسید شده

۱۰۳	..... ۵-۳- منطقه سوپرژن (غنی شده)
۱۰۳	..... ۵-۴- منطقه هیوژن
۱۰۴	..... ۵-۶- مطالعات زیست محیطی مربوط به منطقه
۱۰۴	..... ۵-۷- روش تحقیق، مواد و نتایج آنالیز نمونه‌ها
۱۰۶	..... ۵-۸- مکان‌های نمونه برداری
	..... ۵-۹- بررسی روند تغییرات فلزات سنگین، سولفات و اسیدیته از بالادست به پایین دست
۱۰۸	..... رودخانه شور
۱۱۰	..... ۵-۱۰- مدل سازی انتقال فلزات سنگین، سولفات و اسیدیته در رودخانه شور
۱۱۰	..... ۵-۱۰-۱- مدل سازی انتقال و فرآیند جذب
	..... ۵-۱۰-۲- مدل سازی انتقال آلاینده‌های فلزی، سولفات و تغییرات pH در حالت یک بعدی در رودخانه شور، پایین دست معدن مس سرچشمه، با در نظر گرفتن فرآیند جذب خطی
۱۱۲	..... ۵-۱۰-۳- مدل سازی انتقال یون‌های فلزی، سولفات و تغییرات pH در حالت یک بعدی در رودخانه شور، پایین دست معدن مس سرچشمه، با در نظر گرفتن فرآیند جذب غیرخطی با ایزوترم لانگمویر
۱۱۸	..... ۵-۱۰-۴- مدل سازی انتقال واکنشی آهن دوظرفیتی و تغییرات pH با در نظر گرفتن واکنش‌های آهن دوظرفیتی و جذب غیرخطی در رودخانه شور، معدن مس سرچشمه
۱۲۲	..... ۵-۱۰-۴-۱- فرضیات و مبنای مدل‌های آب‌های سطحی
۱۲۵	..... ۵-۱۰-۴-۲- ارائه مدل انتقال رودخانه شور

### فصل ششم: نتیجه گیری و پیشنهادات

۱۲۹	..... ۶-۱- نتایج
۱۲۹	..... ۶-۱-۱- نتایج مدل سازی عددی در دو حالت پیوسته و یا لحظه‌ای منبع تولید آلاینده
	..... ۶-۱-۲- نتایج مدل سازی عددی جذب بیولوژیکی فلزات مس و منگنز در زهاب اسیدی معدن مس سرچشمه توسط بیومس قارچی اسپیرژیلوس نایجر در یک رآکتور پیوسته
۱۳۰	..... ۶-۱-۳- نتایج مدل سازی عددی فرآیندهای حاکم بر انتقال و تحول آلاینده‌های فلزی ناشی از تولید زهاب اسیدی در رودخانه شور پایین دست معدن مس سرچشمه
۱۳۲	..... ۶-۲- پیشنهادات
۱۳۳	..... منابع و مراجع

### فهرست جداول

۳۵	..... جدول (۳-۱): مقایسه کدهای CFD
----	------------------------------------

- جدول (۵-۱): میزان ذخیره و عیار متوسط در معدن سرچشمه ..... ۹۶
- جدول (۵-۲): محل و موقعیت جغرافیایی ایستگاه‌های نمونه‌برداری آب ..... ۱۰۵
- جدول (۵-۳): نتایج آنالیز نمونه‌ها برای فلزات سنگین، سولفات و pH ..... ۱۰۶

### فهرست اشکال

- شکل (۱-۱): واکنش‌های شیمیایی در اثر ورود زهاب اسیدی حاوی آهن به داخل رودخانه ..... ۱۲
- شکل (۱-۲): مدل مغزه انقباضی نشان دهنده عوامل مؤثر در تولید زهاب اسیدی و اکسایش پیریت در محل انباشت باطله‌های سولفیدی ..... ۱۹
- شکل (۲-۲): فرآیندهای اصلی حاکم بر انتقال آلاینده‌ها ..... ۲۰
- شکل (۳-۲): فرآیندهای درگیر در انتقال، رقیق شدگی و مهاجرت آلاینده‌ها در محیط آبی ..... ۲۴
- شکل (۴-۲): انتقال آلاینده از منبع آبی در جهت جریان آب با سرعت  $V$  ..... ۲۵
- شکل (۵-۲): انتقال آلاینده از یک منبع پیوسته در جهت جریان آب با سرعت  $V$  ..... ۲۶
- شکل (۶-۲): عوامل به وجود آورنده پراکندگی مکانیکی ..... ۲۷
- شکل (۷-۲): آنالیز ذرات یک آلاینده در جریان عبوری از یک محیط متخلخل ..... ۲۹
- شکل (۸-۲): انتقال آلاینده از سطح یک سد باطله به داخل آب زیرزمینی ..... ۳۰
- شکل (۱-۳): طرح شماتیکی از سه عمل اصلی نرم افزار PHOENICS ..... ۳۷
- شکل (۲-۳): فلوچارت انجام فازهای اصلی در آنالیزهای CFD ..... ۳۸
- شکل (۳-۳): مراحل حل مسأله توسط نرم‌افزار PHOENICS ..... ۳۹
- شکل (۱-۴): مدل مفهومی مربوط به محدوده پخش آلودگی و مش‌بندی مناسب برای رودخانه در حالت یک‌بعدی ..... ۵۹
- شکل (۲-۴): مقایسه نتایج مدل‌سازی تحلیلی (خطوط) و عددی (نقاط) انتقال پیوسته آلودگی به ترتیب در زمان‌های ۲، ۵، ۱۰، ۱۵، ۲۰ و ۲۵ ثانیه ..... ۶۲
- شکل (۳-۴): مقایسه نتایج مدل‌سازی تحلیلی (خطوط) و عددی (نقاط) انتقال پیوسته آلودگی به ترتیب در زمان‌های ۲، ۵، ۱۰، ۱۵، ۲۰ و ۲۵ ثانیه ..... ۶۳
- شکل (۴-۴): مدل مفهومی دوبعدی و شرایط مرزی مربوط به محدوده آلودگی و مش‌بندی مناسب ..... ۶۵
- شکل (۵-۴): نتایج مربوط به مدل‌سازی عددی دوبعدی معادله انتقال آلودگی در زمان‌های ۲، ۵، ۱۰، ۱۵، ۲۰ و ۲۵ ثانیه شامل فرآیندهای پهنرفت-پراکندگی در حالت پیوسته بودن منبع آلودگی ... ۶۷
- شکل (۶-۴): نتایج مربوط به مدل‌سازی عددی دوبعدی معادله انتقال در زمان‌های ۲، ۵، ۱۰، ۱۵، ۲۰ و ۲۵ ثانیه شامل فرآیندهای پهنرفت-پراکندگی در حالت گسسته بودن منبع آلودگی ..... ۶۹

- شکل (۷-۴): مدل مربوط به ستون جذب و مش بندی مناسب در حالت یک بعدی ..... ۷۴
- شکل (۸-۴): مقایسه منحنی های رخنه حاصل از حل تحلیلی (نقاط) و مدل سازی عددی (خطوط) در سه دبی برای یون های فلزی  $\text{Cu}^{2+}$  یا  $\text{Mn}^{2+}$  بدون فرآیند جذب ..... ۷۵
- شکل (۹-۴): مقایسه منحنی های رخنه حاصل از فرمول تحلیلی (۴-۱۷) (نقاط) و مدل سازی عددی (خطوط) در سه دبی مختلف برای یون فلزی  $\text{Cu}^{2+}$  در حالت جذب خطی ..... ۷۷
- شکل (۱۰-۴): مقایسه منحنی های رخنه حاصل از فرمول تحلیلی (۴-۱۷) (نقاط) و مدل سازی عددی (خطوط) در سه دبی مختلف برای یون فلزی  $\text{Mn}^{2+}$  در حالت جذب خطی ..... ۷۸
- شکل (۱۱-۴): مقایسه منحنی های رخنه حاصل از نتایج آزمایشگاهی (نقاط) (دولتی ارده جانی و دیگران، ۱۳۸۸) و مدل سازی عددی (خطوط) در سه دبی مختلف برای یون فلزی  $\text{Cu}^{2+}$  در حالت جذب غیر خطی با مدل لانگمویر ..... ۸۲
- شکل (۱۲-۴): مقایسه منحنی های رخنه حاصل از نتایج آزمایشگاهی (نقاط) (دولتی ارده جانی و دیگران، ۱۳۸۸) و مدل سازی عددی (خطوط) در سه دبی مختلف برای یون فلزی  $\text{Mn}^{2+}$  در حالت جذب غیر خطی با مدل لانگمویر ..... ۸۲
- شکل (۱۳-۴): مقایسه منحنی های رخنه حاصل از نتایج آزمایشگاهی (نقاط) (دولتی ارده جانی و دیگران، ۱۳۸۸) و مدل سازی عددی (خطوط) در سه دبی مختلف برای یون فلزی  $\text{Cu}^{2+}$  در حالت جذب غیر خطی با مدل یون-نلسون ..... ۸۵
- شکل (۱۴-۴): مقایسه منحنی های رخنه حاصل از نتایج آزمایشگاهی (نقاط) (دولتی ارده جانی و دیگران، ۱۳۸۸) و مدل سازی عددی (خطوط) در سه دبی مختلف برای یون فلزی  $\text{Mn}^{2+}$  در حالت جذب غیر خطی با مدل یون-نلسون ..... ۸۵
- شکل (۱۵-۴): بررسی تأثیر تغییر چگالی بالک ( $\rho_b$ ,  $gr/cm^3$ ) بر میزان جذب در مدل ایزوترم لانگمویر ..... ۸۷
- شکل (۱۶-۴): بررسی تأثیر تغییر ثابت لانگمویر ( $K_1$ ) بر میزان جذب در مدل ایزوترم لانگمویر ..... ۸۸
- شکل (۱۷-۴): بررسی تأثیر تغییر بیشترین ظرفیت جذب ( $Q_0$ ) بر میزان جذب در مدل ایزوترم لانگمویر ..... ۸۸
- شکل (۱۸-۴): بررسی تأثیر تغییر ثابت سرعت ( $K_2$ ) بر میزان جذب در مدل سینتیکی یون-نلسون ..... ۸۹
- شکل (۱۹-۴): بررسی تأثیر تغییر جذب تعادلی ( $q_e$ ) بر میزان جذب در مدل سینتیکی یون-نلسون ..... ۹۰
- شکل (۲۰-۴): بررسی تأثیر تغییر طول رآکتور بر میزان جذب ..... ۹۱

- شکل (۵-۱): موقعیت شهرک سرچشمه، راه‌های دسترسی، موقعیت شهرک نسبت به مجتمع و معدن مس سرچشمه در تصویر ماهواره‌ای ..... ۹۴
- شکل (۵-۲): نقشه زمین‌شناسی حوزه سرچشمه ..... ۱۰۱
- شکل (۵-۳): محل‌های نمونه برداری و موقعیت معدن سرچشمه ..... ۱۰۷
- شکل (۵-۴): روند تغییرات غلظت یون‌های فلزی از بالادست به سمت پایین دست رودخانه شور . ۱۰۹
- شکل (۵-۵): روند تغییرات غلظت سولفات از بالادست به سمت پایین دست رودخانه شور ..... ۱۰۹
- شکل (۵-۶): روند تغییرات pH از بالادست به سمت پایین دست رودخانه شور ..... ۱۱۰
- شکل (۵-۷): مدل مفهومی مربوط به محدوده پخش آلودگی و مش‌بندی مناسب برای رودخانه در حالت یک بعدی ..... ۱۱۲
- شکل (۵-۸): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز مس در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب خطی ..... ۱۱۴
- شکل (۵-۹): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز منگنز در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب خطی ..... ۱۱۵
- شکل (۵-۱۰): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز آهن در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب خطی ..... ۱۱۵
- شکل (۵-۱۱): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز کادمیم در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب خطی ..... ۱۱۵
- شکل (۵-۱۲): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز سرب در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب خطی ..... ۱۱۶
- شکل (۵-۱۳): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز کروم در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب خطی ..... ۱۱۶
- شکل (۵-۱۴): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز مولیبدون در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب خطی ..... ۱۱۶
- شکل (۵-۱۵): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز روی در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب خطی ..... ۱۱۷
- شکل (۵-۱۶): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت سولفات در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب خطی ..... ۱۱۷
- شکل (۵-۱۷): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع pH در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب خطی ..... ۱۱۷

- شکل (۵-۱۸): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز مس در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب غیرخطی لانگمویر ..... ۱۱۹
- شکل (۵-۱۹): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز منگنز در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب غیرخطی لانگمویر ..... ۱۱۹
- شکل (۵-۲۰): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز آهن در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب غیرخطی لانگمویر ..... ۱۲۰
- شکل (۵-۲۱): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز کادمیم در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب غیرخطی لانگمویر ..... ۱۲۰
- شکل (۵-۲۲): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز سرب در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب غیرخطی لانگمویر ..... ۱۲۰
- شکل (۵-۲۳): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز کروم در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب غیرخطی لانگمویر ..... ۱۲۱
- شکل (۵-۲۴): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز مولیبدون در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب غیرخطی لانگمویر ..... ۱۲۱
- شکل (۵-۲۵): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز روی در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب غیرخطی لانگمویر ..... ۱۲۱
- شکل (۵-۲۶): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت سولفات در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب غیرخطی لانگمویر ..... ۱۲۲
- شکل (۵-۲۷): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع pH در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب غیرخطی لانگمویر ..... ۱۲۲
- شکل (۵-۲۸): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت  $Fe^{2+}$  در رودخانه شور با در نظر گرفتن سینتیک جذب غیرخطی، واکنش اکسیداسیون آهن دو ظرفیتی و اسیدیته متغیر ..... ۱۲۷
- شکل (۵-۲۹): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع pH در رودخانه شور با در نظر گرفتن سینتیک جذب غیرخطی، واکنش اکسایش آهن دو ظرفیتی و اسیدیته متغیر ..... ۱۲۷

## فصل اول

### مقدمه

## ۱-۱ - مقدمه

حل معادلات حاکم در مکانیک سیالات یکی از مطرح‌ترین مسائل در علوم مهندسی است. در اغلب موارد فرمول‌بندی قوانین پایه مکانیک سیالات به صورت معادلات دیفرانسیل پاره‌ای<sup>۱</sup> (PDE) در می‌آید. بیشتر معادلات به صورت PDE های مرتبه دوم ظاهر می‌شوند. بنابراین در مکانیک سیالات، مسائل انتقال جرم و انتقال حرارت از اهمیت ویژه‌ای برخوردار هستند. در بیشتر موارد، حل تحلیلی معادلات مکانیک سیالات بسیار محدود است و با اعمال شرایط مرزی، این محدودیت‌ها بیشتر می‌شود. روشی که در سال‌های اخیر شهرت زیادی یافته، روش دینامیک سیالات محاسباتی<sup>۲</sup> (CFD) است. البته تحلیل‌های عددی برای سالیان دراز مطرح بوده است. پیشرفت‌های به دست آمده در امر ساخت کامپیوترها که سبب افزایش حافظه و کارایی آنها شده است، امکان حل معادلات مکانیک سیالات را با استفاده از روش‌های عددی مختلف فراهم کرده است. جوابی را که از حل عددی معادلات حاکم بر مسائل با استفاده از برنامه نویسی به دست می‌آید، می‌توان پس از مقایسه با نتایج تجربی مورد تأیید قرار داد، اما پس از آنکه درستی چنین برنامه‌ای مورد تأیید قرار گرفت، از آن برنامه می‌توان برای طراحی‌های مختلف و همچنین پیش‌بینی تغییرات پارامترها و مجهولات مدل‌سازی در مسئله استفاده کرد (Klaus and Steve, 1993).

بسیاری از مسائل زیست محیطی نیازمند درک و تحلیل صحیح جریان سیال یا گاز هستند تا بتوانند مورد مدل‌سازی قرار بگیرند. به عنوان مثال می‌توان به جریان آب زیرزمینی، انتقال آلاینده‌ها، انتقال حرارت، انفجار مواد، پیشروی حریق و حرکت گرد و خاک و ... اشاره نمود. هم کار آزمایشگاهی و هم مدل‌سازی عددی می‌تواند اطلاعات مورد نیاز برای حل هر مسئله بخصوصی را فراهم کند (دولتی ارده‌جانی و دیگران، ۱۳۸۴).

<sup>۱</sup> Partial Differential Equations\

<sup>۲</sup> Computational Fluid Dynamics

CFD به عنوان یک ابزار برای مدل‌سازی مسائل جریان از دو دهه اخیر به طور چشم‌گیری مورد استفاده قرار گرفته است. با توجه به کارایی بالا، دسترسی آسان به کامپیوترها و پیشرفت سریع آنها و روش‌های محاسباتی، CFD به سرعت به عنوان ابزاری کم‌هزینه جهت طراحی، مدل‌سازی و پیش‌بینی در آمده است. روش‌های حل عددی ممکن است که در آنالیزهای CFD برای مدل‌سازی جریان سیال و گاز و مسائل انتقال جرم به کار روند، به شرط آنکه این مسائل به صورت عبارت یا ترم‌هایی از PDE بیان شوند. CFD ابزاری قدرتمند و کاربردی در زمینه‌های مختلفی مانند آیرودینامیک و هواپیما، تکنولوژی حمل و نقل، کنترل و تعیین نحوه پخش آلودگی، نیروگاه‌ها، ماشین‌آلات توربینی، مهندسی الکترونیک و سیستم‌های الکتریکی، مهندسی راه و ساختمان، آب‌شناسی و اقیانوس‌شناسی، هواشناسی و علوم پزشکی می‌باشد. CFD ابزار تحلیل سیستم‌های در برگیرنده جریان سیال، حرارت و انتقال جرم و بررسی ارتباط میان پدیده‌هایی مانند واکنش‌های شیمیایی به کار رفته در کامپیوتر بر مبنای شبیه‌سازی می‌باشد. کدهای CFD کاربران را قادر می‌سازد که در محاسبات حل عددی براساس معادله حاکم بر مسئله از تکنیک‌های گسسته‌سازی مانند تفاوت محدود، اجزاء محدود و حجم‌های محدود استفاده کنند. به طور مثال می‌توان جهت ارائه یک مدل عددی برای پیش‌بینی پتانسیل آلودگی در سد باطله یک معدن روباز از آنالیزهای CFD استفاده کرد (Doulati Ardejani et al., 2004 a).

از بین نرم‌افزارهای مربوط به CFD می‌توان به STAR-CD, FLUENT, FLOW3D و PHOENICS اشاره کرد (Versteeg and Malasekera, 1995)، که از این میان نرم‌افزار PHOENICS با داشتن قابلیت کدنویسی (Spalding, 1982)، می‌تواند به طور بهینه واکنش‌های درگیر در اکسایش پیریت، تولید اسید و سپس انتقال و توزیع آلاینده‌ها را در آب‌های سطحی و آب‌های زیرزمینی و دمپ‌های باطله شبیه‌سازی کند (Doulati Ardejani et al., 2004a).

در این پایان نامه مدل سازی انتقال آلاینده های موجود در زهاب اسیدی رودخانه شور، معدن مس سرچشمه با استفاده از روش حجم های محدود و به کمک نرم افزار PHPENICS انجام شده است. به همین منظور بعد از معرفی کلیات، کاربردها، مبانی و نرم افزار PHPENICS، ابتدا دو مسئله برای کالیبراسیون مدل عددی حجم های محدود رودخانه شور مدل سازی شده است. مسئله اول مربوط به مدل سازی انتقال آلاینده های فلزی در رودخانه های متأثر از زهاب اسیدی معدن است. جهت مدل سازی، کدنویسی های لازم بر اساس معادله حاکم بر انتقال آلودگی در قالب نرم افزار MATLAB انجام شده است. رفتار مدل در حالت یک و دو بعدی با در نظر گرفتن نوع منبع تولید کننده آلاینده مورد بررسی قرار گرفته است. مسئله دوم هم به مدل سازی عددی جذب بیولوژیکی فلزات مس و منگنز در زهاب اسیدی معدن مس سرچشمه توسط بیومس قارچی اسپرژیلوس نایجر در یک رآکتور پیوسته با در نظر گرفتن فرآیند جذب در حالات مختلف و استفاده از داده های آزمایشگاهی و روابط تحلیلی مربوط است که با استفاده از نرم افزار PHOENICS انجام شده است. هر دو مسئله به تفصیل بررسی شده است. سپس با توجه به کالیبره بودن مدل عددی حجم های محدود مدل سازی انتقال آلاینده های موجود در زهاب اسیدی رودخانه شور، معدن مس سرچشمه انجام گردید. نتایج به دست آمده در هر حالت به شکل مناسب آورده شده است و تلاش شده تا پیش بینی هایی در مورد روند تولید آلودگی، پخش و نحوه انتقال آلودگی صورت پذیرد.

## ۱-۲- تأثیر فعالیت های معدنی بر کیفیت آبها

فعالیت های معدنی بر روی پارامترهای هیدرولوژیکی، هیدروژئولوژیکی و در نتیجه روی کیفیت آب تأثیر می گذارند. در اثر فعالیت های معدنی، مواد معدنی با ارزش در یک منطقه استخراج و باطله های همراه با آنها در محل های دیگری انباشته می شوند. در نتیجه این عمل، شکل و توپوگرافی طبیعی زمین تغییر

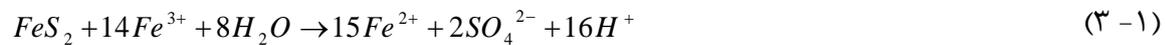
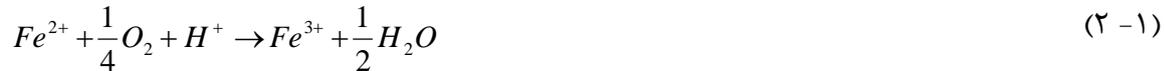
می‌کند و توازن طبیعت دستخوش تغییر خواهد شد. بسیاری از باطله‌های معدنی سمی بوده و بطور خطرناکی تأثیر مستقیم و غیرمستقیم بر محیط زیست دارند. در صورتی که باطله‌های معادن به درستی کنترل نشوند و یا مدیریت زیست محیطی صحیحی روی آنها اعمال نشود، مواد سمی و مضر آنها سبب آلودگی آب‌های سطحی، رودخانه‌ها، آب‌های زیرزمینی و خاک‌ها می‌شود. آلاینده‌ها یا به صورت طبیعی و یا در اثر فعالیت‌های انسانی مانند معدنکاری و ... وارد محیط‌زیست می‌شوند. به طور مثال فلزات سنگین که از آلاینده‌های مهم زیست‌محیطی هستند، به صورت کاتیون‌های محلول می‌باشند (Williams, 1975).

### ۱-۳- زهاب اسیدی معدن

زهاب اسیدی معدن یا AMD واژه‌ای است که به مواد شسته شده اسیدی حاوی فلزات و سولفات‌ها اطلاق می‌شود، که می‌تواند از اکسایش کانی‌های سولفیدی به ویژه پیریت در باطله‌های کارخانه فرآوری این کانی‌ها، دمپ‌های باطله کم عیار معادن سولفیدی و همچنین معادن زغال سنگ حاصل شود (Equeenuddin et al., 2009). پیریت مهمترین کانی سولفیدی از نظر تشکیل زهاب اسیدی است. پیریت و دیگر کانی‌های سولفیدی در باطله‌های معدنی در معرض آب، اکسیژن هوا و یا آهن سه ظرفیتی اکسید شده و تولید اسید (عموماً با  $\text{pH}=2/4$ ) به همراه آهن، سولفات‌ها و فلزات سمی می‌نماید (Singer and Stumm, 1970). هنگامی که این محلول‌های اسیدی غنی از فلزات سنگین در رودخانه‌ها و دریاچه‌ها تخلیه می‌شوند، سبب آلودگی آب می‌گردد. مهمترین واکنش‌های اکسایش پیریت به صورت واکنش‌های (۱-۱) تا (۱-۳) است (Williams et al., 1979):



<sup>1</sup> Acid Mine Drainage



مطابق واکنش (۱-۱)، زهاب اسیدی معدن از اکسیداسیون مستقیم کانی پیریت با اکسیژن و آب یا رطوبت تشکیل شده است، که نتیجه آن تولید گونه‌های محلول  $H^+$ ،  $SO_4^{2-}$  و  $Fe^{2+}$  می‌باشد (Singer and Stumm, 1970).

چنین پساب‌های اسیدی با pH پایین، حاوی غلظت‌های بالایی از سولفات‌های آهن و دیگر آلاینده‌ها می‌باشند که وقتی به آب‌های سطحی غیر آلوده منطقه تخلیه می‌شوند، روی کیفیت آنها تأثیر می‌گذارند و اثرات زیست محیطی دراز مدتی را به بار می‌آورد (National Coal Board, 1982).

کیفیت زهاب‌های معدنی به عوامل متعددی از جمله زمین‌شناسی منطقه، پارامترهای معدنی و مشخصات هیدروژئولوژیکی که در نواحی مختلف معدنی کاملاً متفاوت است، بستگی دارد. کمی‌کردن فرآیند تولید زهاب اسیدی، اکسایش پیریت، تولید و انتشار آلودگی و استفاده از مدل‌های مناسب که بتواند میزان نرخ اکسایش پیریت و لیچینگ آلاینده‌ها را تشریح نماید، در طراحی یک استراتژی مناسب برای مدیریت باطله‌های معدنی و کاهش آلودگی‌های زیست محیطی ناشی از آنها می‌تواند مؤثر واقع گردد (Cathles and Apps, 1975 ; Cathles, 1979).

#### ۴-۱- ضرورت انجام تحقیق حاضر

محیط زیست از ارکان توسعه پایدار در هر کشوری است. بدون توجه به مسئله محیط زیست منابع طبیعی و انسانی دچار نقصان شده و این بی‌توجهی پیامدهای ناگواری را بر کره خاکی و جوامع انسانی

خواهد گذاشت. معدنکاری مواد لازم برای حیات و پیشرفت بشر را فراهم می‌کند و از طرفی با افزایش آلودگی‌ها امکان حیات و استفاده از محیط زیست سالم را از بشر سلب می‌کند. به همین جهت در بسیاری از کشورها، تأثیرات زیست محیطی عملیات معدنکاری مورد بررسی قرار گرفته و در نهایت استانداردهایی در این زمینه برای فعالیتهای معدنی و حدود آلودگی‌های مختلف حاصل از این صنعت در نظر گرفته شده است. با توجه به اینکه ایران یک کشور در حال توسعه است و برای پیشرفت خود ناچار به توسعه معادن است، بنابراین برای توسعه پایدار صنعت معدن کشور لازم است تا جنبه‌های زیست محیطی صنایع معدنی کشور (با توجه به اقلیم کشور) مورد شناسایی قرار گیرد.

همانطور که گفته شد، امروزه یکی از مشکلات اصلی در صنایع معدنی و ...، تولید زهاب اسیدی و آلودگی منابع آب سطحی و زیرزمینی توسط فلزات سنگین می‌باشد، که این مشکل در معدن مس سرچشمه به وضوح دیده می‌شود. آب‌های زیرزمینی و سطحی یکی از مهم‌ترین منابع آبی هستند که از آنها برای مقاصد صنعتی، کشاورزی و آشامیدنی استفاده می‌شود. نشتی‌های حاصل از اکسایش کانی‌های سولفیدی، تولید زهاب اسیدی و راهیابی آلاینده‌های فلزی به منابع آب‌های زیرزمینی و سطحی سبب آلودگی آنها می‌گردد. با توجه به اینکه منابع آب‌های سطحی و زیرزمینی توسط زهاب‌های اسیدی و آلاینده‌های فلزی به راحتی آلوده می‌گردند و از طرفی پاک‌سازی این آب‌ها از آلودگی یک فرآیند طولانی مدت و هزینه‌بر می‌باشد، بنابراین بکارگیری CFD در مدل‌سازی مکانیزم‌های حاکم بر انتقال آلاینده‌ها در سفره آب‌ها و پیش‌بینی محدوده آلودگی حاصل از مسائل مهم و روز مباحث محیط‌زیست است، که ضمن تعیین محدوده آلودگی احتمالی، می‌تواند ما را در ارائه راهکارهای کنترلی و طراحی استراتژی‌های مناسب جهت حفاظت منابع آب زیرزمینی و پاک‌سازی مناطق آلوده یاری نماید. بعلاوه، این مدل‌ها قادر هستند تا وضعیت رقیق‌سازی آلاینده‌ها را در آب‌های سطحی با در نظر گرفتن واکنش‌های شیمیایی ضمن انتقال فیزیکی شبیه‌سازی نمایند. در این تحقیق همچنین سعی خواهد شد که به سؤالات زیر پاسخ داده شود:

- آیا مدل سازی عددی به روش CFD می تواند محدوده آلودگی ناشی از نشت زهاب اسیدی و آلاینده های فلزی را در آب های سطحی مشخص سازد؟

- آیا مدل ارائه شده در این تحقیق می تواند مهم ترین مکانیزم های مؤثر در رقیق سازی آلاینده های فلزی در آب های سطحی را مشخص سازد؟

اگر چه تلاش های زیادی جهت مدل سازی اکسایش کانی های سولفیدی، تولید زهاب اسیدی معدن و انتقال محصولات اکسایش در سیستم جریان آب های سطحی و زیرزمینی در ارتباط با معادن فلزی توسط محققینی مانند کاتلس و آپس<sup>۱</sup>، داویس و ریچی<sup>۲</sup>، اریکسون و دستونی<sup>۳</sup>، هربرت<sup>۴</sup>، چن و همکاران<sup>۵</sup> انجام شده است (Eriksson and Destouni, 1997 ;Davis and Ritchie, 1986a ;Chen et al,1999 ; Herbert, 1994)، ولی هنوز انجام کارهای تحقیقاتی زیادی روی مدل سازی فرآیندهای درگیر در رقیق سازی آلاینده های فلزی در سیستم جریان آب های سطحی و زیرزمینی ضرورت دارد تا محدوده آلودگی ها به درستی تعیین گردد.

از ویژگی های مهم کاربردی مدل سازی عددی پیشنهادی در این تحقیق، پیش بینی بسیاری از فرآیندهای درگیر ضمن انتقال واکنشی آلاینده های فلزی، پیش بینی گسترش پلوم آلودگی و شناسایی منطقه آلوده می باشد، که در این میان، نرم افزارهای دینامیک سیالات محاسباتی که قابلیت کدنویسی دارند، می توانند به عنوان یک ابزار مناسب نقش مهمی ایفا نمایند.

<sup>1</sup> Cathles and Apps

<sup>2</sup> Davis and Ritchie

<sup>3</sup> Eriksson and Destouni

<sup>4</sup> Herbert

<sup>5</sup> Chen et al

## ۱-۵- مروری بر کارهای انجام شده

فعالیت‌های معدنی تعادل سیستم‌های آبی موجود در داخل زمین را از بین برده و اثرات زیست محیطی دراز مدتی را به بار می‌آورد. در غالب عملیات معدن‌کاری منطقه معدنی به حالتی غیرقابل استفاده رها می‌شود. در مناطق معدنی مشکلاتی از قبیل زهاب‌های اسیدی معدن و آلودگی توسط فلزات سنگین به عنوان مشکلات عمده آلودگی آب‌ها شناخته شده‌اند. چنین زهاب‌های اسیدی با pH کم، حاوی غلظت‌های بالایی از سولفات‌های آهن و دیگر آلاینده‌ها فلزی می‌باشند و زمانی که به آب‌های غیر آلوده منطقه تخلیه می‌شوند روی کیفیت آنها تأثیر می‌گذارند. کیفیت زهاب‌های معدنی به عوامل متعددی از جمله زمین‌شناسی منطقه، مشخصات هیدروژئولوژیکی و پارامترهای معدنی که در نواحی مختلف معدنی کاملاً متفاوت هستند، بستگی دارد. در واقع باطله‌های معادن عموماً شامل کانی‌های سولفیدی متفاوتی است که معمولاً حاوی آهن و سایر فلزات سنگین و ... است. فلزات سنگین در چرخه هیدرولوژیکی از هر یک از دو منبع طبیعی<sup>۱</sup> و انسانی نشأت می‌گیرند. ماکلین<sup>۲</sup> در سال ۱۹۹۲ با مقایسه مقادیر آزاد شده از دو منبع مذکور تأکید کرده است که بشر مهمترین عامل در چرخه بیوشیمیایی در منشأ فلزات شده است (Macklin, 1992). فعالیت‌های انسان‌زاد<sup>۳</sup> که توسط فوستر و کارلس ارائه شده است، شامل شهرنشینی (حمل و نقل، صنعت، فاضلاب و زهاب باطله‌های معدن)، فعالیت‌های کشاورزی و معدنی می‌باشد (Foster and Charles, 1996). مطالعاتی که توسط سینگ<sup>۴</sup> و همکارانش در سال ۲۰۰۳ بر روی رسوبات رودخانه گنگ در هند صورت گرفته است، نشان می‌دهد که رسوبات رودخانه در قسمت‌های شمالی در مقایسه با قسمت‌های جنوبی غنی‌شدگی شدیدی نسبت به فلزات آهن، کرم، کبالت، نیکل و مس دارند و این مسئله به این دلیل است که فلزات سنگین به خصوص عناصر سنگینی مثل کرم و منگنز

<sup>1</sup> Natural

<sup>2</sup> Maklin

<sup>3</sup> Anthropogenic

<sup>4</sup> Singh

و ... در قسمت‌های شمالی از کوه‌های هیمالیا منشأ می‌گیرند و همچنین هوازدگی شدید و بادهای موسمی هند در افزایش فلزات سنگین در رسوبات رودخانه مذکور مؤثر است (Singh et al., 2003).

بر اساس مطالعات بیبی و دیگران<sup>۱</sup> در سال ۲۰۰۷، آلاینده‌های محلول در محدوده آب‌های معدنی اغلب یون‌های فلزی هستند، ولی گاهی نیترات، سولفات و مواد رادیواکتیو را نیز شامل می‌شود. این یون‌ها از محدوده‌های معدنی به اطراف مهاجرت کرده و آب‌های سطحی و زیرزمینی را آلوده می‌کنند. مهمترین یون‌های فلزی محلول شامل Fe, Cu, Pb, Ag, Mn, Cd, As و Zn می‌باشند. غلظت بالای یون‌های فلزی و در نتیجه pH پایین، سبب بروز اثرات خاصی در انسان می‌شود و گاهی منجر به بیماری‌ها و حتی مرگ می‌گردد (Bibi et al., 2007).

مطالعاتی که توسط شینتو<sup>۲</sup> در سال ۱۹۹۹ بر روی مخازن و منابع آب آشامیدنی در پایین دست مناطق معدنی در ایتالیا صورت گرفته است، نشان می‌دهد که مقادیر بسیار زیادی از عناصر کادمیم، سرب و مس در شاخه‌های مختلف رودخانه‌های منطقه بر اثر ورود زهاب‌های اسیدی معادن وجود داشته و علاوه بر آن در رسوب رودخانه‌ها مقادیر بالایی از فلزات فوق مشاهده شده است. همچنین مشخص شده است که بخش مهمی از فلزات کادمیم و سرب به صورت ترکیب‌های آلی و محلول در آب وجود دارد (Schintu, 1991).

در سال‌های ۱۹۹۶-۱۹۹۷ مطالعاتی در رودخانه لی‌آن<sup>۳</sup> در چین برای بررسی میزان فلزات سنگین صورت گرفت. منطقه به هشت سایت نمونه برداری تقسیم شده و به ترتیب مورد بررسی قرار گرفت، که سایت A04 آن به دلیل ورود آب‌های اسیدی از معادن مس بسیار اسیدی می‌باشد و در فصول بارانی غلظت مس حل شده در اغلب پایگاه‌های نمونه‌گیری از سطوح مجاز فراتر می‌رود. بیشترین غلظت فلز

<sup>1</sup> Bibi et al.,

<sup>2</sup> Schintu

<sup>3</sup> Le An

روی در سایت A07 مشاهده شده است، که به دلیل انتشار فلزات از معادن کنار رودخانه جیشو<sup>۱</sup> می‌باشد. بین سایت‌های A04 و A07 آلودگی رسوبات بسیار زیاد می‌باشد. نتایج حاصله از مطالعات و آزمایش‌های زیست محیطی این رودخانه نشان داد که فعالیت‌های معدنی تأثیر عمده‌ای بر جوامع پلانکتون‌ها دارد و زوال تدریجی بیولوژیکی و اکولوژیکی در آب رودخانه تا جایی که در محدوده دلتای دریاچه پویانگ قرار دارد، شایع شده است. فعالیت معادن در منطقه منجر به افزایش چشم‌گیری در غلظت مس، روی و سرب در آب و رسوبات منطقه شده است و pH در این منطقه در فصل‌های بارانی به ۴/۲۵ و در فصول خشک به ۳/۲۴ رسیده و باعث تأثیرات بالقوه‌ای بر روی بیش از ۱۴۶ کیلومتر از پایین دست رودخانه شده است (He et al., 1996).

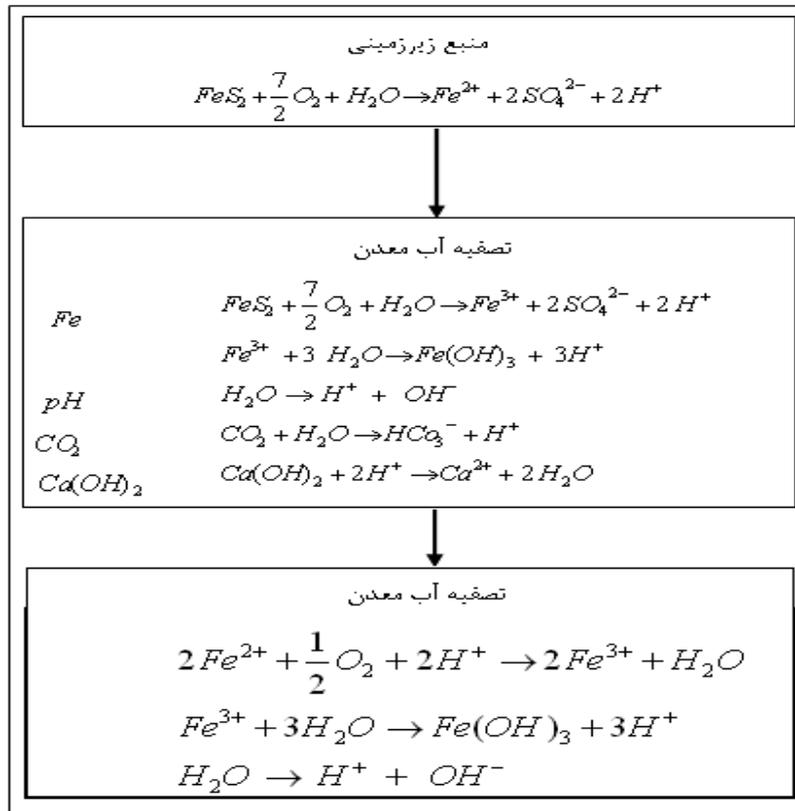
طراحی جهت حفاظت آب، تکنولوژی‌های نیازمند آب و آب معدن تنها زمانی به طور کامل و درست انجام می‌شود که بر مبنای مدل‌های ریاضی مناسب باشد. با توجه به کارهای انجام شده توسط کادن<sup>۲</sup> در سال ۱۹۸۵، معادن لیگنیت<sup>۳</sup> روباز باعث ایجاد مشکلاتی در کیفیت آب این منطقه واقع در کشور آلمان شده است. این مشکلات که مربوط به آب‌های معدنی و جوی می‌باشد، باعث ورود کانی‌های سولفیدی و انواع نمک‌های فلزی محلول و زهاب‌های آلوده و ... شده است. تخلیه زهاب اسیدی آهن‌دار مربوط به معدن به داخل رودخانه پایین دست منطقه مذکور تأثیر بسیار زیادی بر روی کیفیت آب این منطقه گذاشته است (Kaden and Lackner, 1984).

واکنش‌های شیمیایی که در اثر ورود زهاب اسیدی حاوی آهن به داخل رودخانه اتفاق می‌افتد در شکل (۱-۱) نشان داده شده است.

<sup>1</sup> Jishui

<sup>2</sup> Kaden

<sup>3</sup> Lignite



شکل (۱-۱): واکنش‌های شیمیایی در اثر ورود زهاب اسیدی حاوی آهن به داخل رودخانه (Kaden, 1985)

همانطور که از شکل (۱-۱) مشاهده می‌شود، پیریت در زیر سطح بوسیله اکسیژن هوا اکسید می‌شود، در همین زمان آهن (II)، یون‌های سولفات و پروتن ( $H^+$ ) آزاد می‌شود، اسیدیته در آب زیرزمینی افزایش می‌یابد و محصولات واکنش توسط آب از زون شسته شده منتقل شده و غلظت آنها در درون آب افزایش می‌یابد. تمرکز آهن و اسیدیته به خصوص زمانی که غلظت‌شان در آب بالا باشد، سمی است. آب زیرزمینی با افزایش تمرکز  $CO_2$  در نتیجه با فرآیندهای تخریبی<sup>۱</sup> همراه خواهد بود. آهن (II) باقی‌مانده در داخل آب، توسط اکسیژن در رودخانه اکسید شده و مخصوصاً در پیت‌های باقی‌مانده فرآیندهای هیدرولیز و تبخیر بر اساس سینتیک واکنش‌ها و زمان ته‌نشست انجام می‌شود (Kaden, 1985).

<sup>1</sup> Degradation

مدل‌سازی انتقال فلزات سنگین در رودخانه‌ها توسط افراد زیادی بررسی و انجام شده است. زی-کیانگ و هون-شین<sup>۱</sup> در سال ۲۰۰۹ کارهایی در خصوص حالت‌های مختلف جذب و بررسی مدل‌های انتقال آلودگی در رودخانه‌ها انجام داده‌اند (Zhi-Qiang and Hoon-Shin, 2009). کچیاشویلی و همکاران<sup>۲</sup> در سال ۲۰۰۷ با اعمال واکنش‌های موجود در محیط و جذب آلاینده‌ها در حین انتقال به همراه در نظر گرفتن مدل‌های ریاضی حاکم به صورت یک، دو و سه بعدی به بررسی نحوه انتقال آلودگی پرداخته‌اند (Kachiashvili et al., 2007). آنی و همکاران<sup>۳</sup> نیز در سال ۲۰۰۹ کارهایی در خصوص پیش‌بینی توزیع غلظت در رودخانه با در نظر گرفتن جذب و تخمین ضرایب معادله دیفرانسیل جزئی (ضریب سرعت جریان و ضریب پراکندگی) به همراه کالیبراسیون با استفاده از داده‌های آزمایشگاهی، انجام داده‌اند (Ani et al., 2009).

جنبه‌های مختلف مسائل زیست محیطی کانسار مس سرچشمه قبلاً توسط بازین و هوبر<sup>۴</sup> (۱۹۶۹)، قریشی زاده (۱۹۷۸)، آفتابی و عطاپور (۲۰۰۰)، بنیسی و فینچ<sup>۵</sup> (۲۰۰۱)، دولتی ارده‌جانی و دیگران (۲۰۰۵)، عطاپور و آفتابی (۲۰۰۷)، شایسته‌فر و دیگران (۲۰۰۷)، مجیدی و دیگران (۲۰۰۷) و بنی اسدی و دیگران (۲۰۰۸) مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته است (Bani Assadi et al., 2008).

با توجه به تحقیقات هیدروژئوشیمی انجام شده توسط بنی‌اسدی و دیگران در سال ۲۰۰۸ که مشکلات آلودگی در اثر انتقال آلاینده‌های فلزی در اطراف هیپ شماره ۳ معدن مس سرچشمه را مورد بررسی قرار داده است، تأثیر آلودگی ناشی از انتقال فلزات سنگین با نمونه‌گیری از آب رودخانه شور بررسی شده است. پایش‌های زیست محیطی انجام شده نشان داد که مقدار pH در بازه ۲ تا ۴/۳ و شدت

<sup>1</sup> Zhi-Qiang and Hoon-Shin

<sup>2</sup> Kachiashvili et al

<sup>3</sup> Ani et al

<sup>4</sup> Bazin and Hubner

<sup>5</sup> Banisi and Finch

تحرك فلزات سنگین محلول در نقاط مختلف به اختلاف pH آن نقاط بر می‌گردد. همچنین نتایج این تحقیقات نشان می‌دهد که غلظت فلزات سنگین در آب با افزایش فاصله از مرکز هیپ به علت رقیق شدگی در اثر اختلاط با آب‌های غیرآلوده و با توجه به افزایش pH، کاهش نشان می‌دهد و آهن محلول به سرعت از فاز محلول خارج شده و تشکیل رسوب می‌دهد (Bani Assadi et al., 2008).

بررسی اثرات زهاب اسیدی تولید شده بر روی آب‌های سطحی و زیرزمینی با استفاده از نمونه‌گیری از آب چشمه‌ها، چاه‌های اطراف معدن و آب رودخانه شور توسط دولتی ارده‌جانی و دیگران در سال ۲۰۰۸ جهت تجزیه و تحلیل پارامترهای هیدروژئوشیمیایی فلزات سمی انجام شده است. نتایج کار نشان داد که مقدار اسیدیته بالا بوده و میزان سولفات و Fe و فلزات سنگینی مانند Cu, Mo, Mn, Cr, Ni, Pb و Cd بیشتر از مقادیر استاندارد می‌باشد (Doulati Ardejani et al., 2008a).

از آنجا که اثرات تولید زهاب اسیدی معدن طولانی مدت است و هر چند که تلاش‌های زیادی برای جلوگیری از ورود زهاب اسیدی ناشی از باطله‌های اطراف معدن، باطله‌های کارخانه فرآوری و اسید خروجی از هیپ شماره ۳ معدن مس سرچشمه به پایین دست آن از جمله رودخانه شور انجام شده است و هر چند که کارهای زیادی در خصوص بررسی تأثیر آلاینده‌های فلزی بر اکوسیستم رودخانه انجام شده است اما کاری در زمینه مدل‌سازی انتقال و فرآیندهای رقیق شدگی این آلاینده‌ها در رودخانه شور انجام نشده است و انجام این تحقیق و ارائه یک مدل عددی حجم‌های محدود برای پیش‌بینی نحوه انتقال و رقیق شدگی آلاینده‌های فلزی، سولفات و اسیدیته با در نظر گرفتن فرآیندهای جذب و یا سایر واکنش‌ها و حذف این آلاینده‌ها از فاز آبی در حالت‌های مختلف جذب ضروری می‌باشد.

## ۱-۶- اهداف پایان نامه

هدف از این تحقیق مدل سازی انتقال آلاینده های فلزی ناشی از زهاب اسیدی به رودخانه شور واقع در پایین دست معدن مس سرچشمه می باشد. با استفاده از نرم افزار PHOENICS و روش عددی حجم های محدود، مدلی که قادر به پیش بینی نحوه توزیع و انتقال آلاینده ها در داخل رودخانه است، ارائه خواهد شد. با استفاده از چنین مدل هایی می توان اطلاعات گرانبهایی در مورد وضعیت توزیع آلاینده ها در منابع آب های سطحی و زیرزمینی و نحوه کنترل آنها ارائه نمود. بنابر این مسائل زیست محیطی نیز اهمیت روز افزونی برای اعمال روش های پیشگیری و حفاظت از محیط آبی دارند.

بطور کلی نتایج این تحقیق می تواند در جهت ارائه یک سیستم تصفیه مؤثر و مناسب برای آب های آلوده مورد استفاده قرار گیرد. علاوه بر این از نتایج این تحقیق می توان در جهت تهیه یک طرح مدیریت زیست محیطی برای رودخانه های آلوده به آلاینده های فلزی استفاده کرد.

## ۱-۷- فصل بندی پایان نامه

این پایان نامه مشتمل بر شش فصل می باشد. فصل اول شامل مقدمه، تأثیر فعالیت های معدنی بر کیفیت آب ها، زهاب اسیدی معدن، اهداف پروژه، مروری بر کارهای انجام شده و ضرورت انجام پایان نامه است. در فصل دوم به مدل سازی، انواع مدل ها، فرآیندهای حاکم بر انتقال آلاینده ها، فرآیندهای رقیق سازی آلاینده و آلاینده های فلزی اشاره شده است. در فصل سوم ابتدا به بررسی دینامیک سیالات محاسباتی و نرم افزار PHOENICS پرداخته شده و سپس معادله حاکم بر نرم افزار PHOENICS و شرایط داخلی، مرزی و عبارت های تولید و مصرف در مدل ها مورد بررسی قرار گرفته است. در فصل

چهارم دو مسئله برای کالیبراسیون مدل عددی حجم‌های محدود رودخانه شور مدل‌سازی شده است. مسئله اول به مدل‌سازی انتقال آلاینده‌های فلزی در رودخانه‌های متأثر از زهاب اسیدی معدن با استفاده از روش حجم‌های محدود به کمک نرم افزار کدنویسی MATLAB به صورت یک و دو بعدی در دو حالت لحظه‌ای و پیوسته مربوط است. مسئله دوم هم به مدل‌سازی عددی جذب بیولوژیکی فلزات مس و منگنز در زهاب اسیدی معدن مس سرچشمه توسط بیومس قارچی اسپرژیلوس نایجر در یک رآکتور پیوسته با در نظر گرفتن فرآیند جذب در حالات مختلف و استفاده از داده‌های آزمایشگاهی و روابط تحلیلی مربوط است که با استفاده از نرم‌افزار PHOENICS انجام شده است. همچنین در فصل چهارم آنالیز حساسیت بر روی پارامترهای موجود در حالت جذب غیرخطی دو مدل جذب غیرخطی لانگمویر و یون-نلسون انجام شده است. در فصل پنجم، فرآیندهای انتقال و گسترش آلاینده‌های فلزی معدن مس سرچشمه در داخل رودخانه شور توسط نرم‌افزار PHOENICS مدل‌سازی شده است. تلاش شده تا پیش‌بینی‌هایی در مورد روند تولید آلودگی، پخش و نحوه انتقال آلودگی صورت پذیرد. در نهایت در فصل ششم به جمع‌بندی، نتیجه‌گیری و ارائه پیشنهاداتی در ارتباط با پارامترهای زیست‌محیطی مؤثر در نحوه طراحی، عملکرد و مدیریت محیط زیست منطقه پرداخته شده است.

فصل دوم

**مدل سازی و بررسی فرآیندهای حاکم بر  
انتقال آلاینده‌های فلزی**

## ۲-۱- مدل سازی

یک مدل، نماینده یا نمونه کوچکی است از آنچه که در یک سیستم واقعی اتفاق می‌افتد. در واقع مدل حقیقت ساده شده است. هدف از مدل‌سازی این است که دانش و بینش ما را در مورد کلیه فرآیندهایی که ممکن است در یک سیستم واقعی رخ دهد افزایش داده، فرآیندها را پیش‌بینی نموده و با انجام یک سری آنالیزها و مدل‌سازی‌های مکرر، پارامترهای اصلی و تاثیرگذاری که سیستم تحت مدل سازی را تشریح می‌کند، تعیین نماید. اعمال شرایط متفاوت بر یک مدل، جهت سنجش و پیش‌بینی رفتار آن برای شرایط دیگر انجام می‌شود. در واقع با آنالیز حساسیت می‌توان میزان تأثیر عوامل مختلف را سنجش یا ارزیابی کرد. مدل و مدل‌سازی می‌تواند ابزاری مناسب و کم هزینه در طراحی بهینه هر نوع سیستمی باشد. انواع مدل‌های موجود عبارتند از: مدل مفهومی<sup>۱</sup>، مدل فیزیکی<sup>۲</sup>، مدل آنالوگ-الکتریک<sup>۳</sup> و مدل ریاضی<sup>۴</sup> (Wang and Anderson, 1982).

### ۲-۱-۱- مدل مفهومی

مدل‌های مفهومی به صورت توصیفی و کیفی فرآیندهای حاکم را در یک سیستم واقعی تشریح می‌کنند. در شکل (۲-۱) نمونه یک مدل مفهومی (مدل مغزه انقباضی<sup>۵</sup>)، مربوط به باطله‌های حاصل از فرآوری مواد معدنی که در آن نفوذ اکسیژن و اکسایش کانی‌های سولفیدی در حضور اکسیژن، رطوبت و تولید زهاب اسیدی به صورت شماتیک آورده شده است.

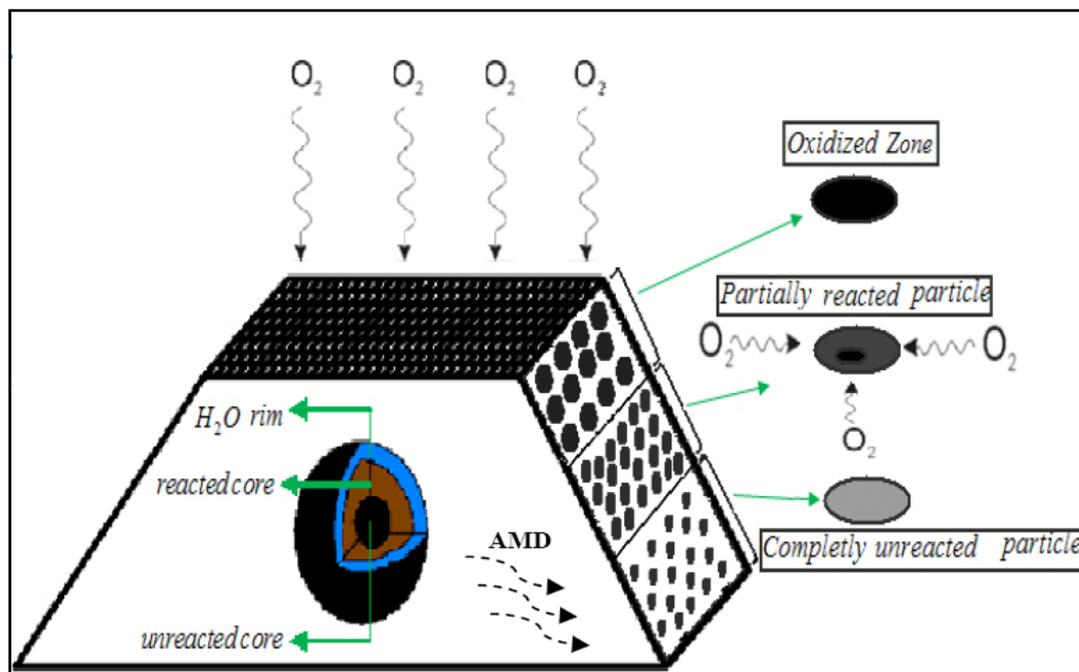
<sup>1</sup> Conceptual Model

<sup>2</sup> Physical Model

<sup>3</sup> Analog-Electric Model

<sup>4</sup> Mathematical Model

<sup>5</sup> Core Shrinking Model



شکل (۱-۲): مدل مغزه انقباضی نشان دهنده عوامل مؤثر در تولید زهاب اسیدی و اکسایش پیریت در محل انباشت باطله‌های سولفیدی (اصلاح شده از Levenspiel, 1972)

## ۲-۱-۲- مدل فیزیکی و مدل آنالوگ-الکترونیک

مدل‌های فیزیکی و آنالوگ-الکترونیک که به صورت واقعی و همراه با یک سری فرض‌ها در مقیاس کوچک ساخته می‌شوند، بسیار هزینه‌بر هستند و این مدل‌ها امروزه کمتر استفاده می‌شوند (دولتی ارده‌جانی و دیگران، ۱۳۸۴). به طور مثال می‌توان به مدل تانک‌های شیشه‌ای<sup>۱</sup> و ردیاب‌های رنگی<sup>۲</sup> اشاره نمود که این مدل فیزیکی برای تشریح چگونگی پراکندگی آلاینده‌ها در محیط‌های متخلخل به کار گرفته شده است. در این مدل فیزیکی ردیاب‌های رنگی تحت فرآیندهای نفوذ، پراکندگی مکانیکی و پهنرفت در ماسه و آب پخش می‌شود. در این مدل از مواد کروم‌دار، نمک‌ها و ... بعنوان ردیاب استفاده می‌شود، که این مواد جایگزین مواد رادیواکتیو شده‌اند. مدل‌های آنالوگ-الکترونیک پیشرفته‌تر از مدل‌های

<sup>1</sup> Glass Tank

<sup>2</sup> Dye Tracer

فیزیکی هستند، اما نسبت به آنها گرانتر می‌باشند. این مدل‌ها بر اساس شباهت‌های ریاضی که بین متغیرهای کنترل‌کننده یک سیستم تحت بررسی و متغیرهای کنترل‌کننده جریان الکتریکی وجود دارد، استوار هستند. یک مدل آنالوگ-الکترونیک از یک مدار الکتریکی شامل تعدادی مقاومت و خازن تشکیل شده است. در یک مدل آنالوگ-الکترونیک متغیرهای کنترل‌کننده رفتار یک سیستم باید طوری عمل کنند که مشابه مقاومت‌ها و خازن‌ها در یک مدار الکتریکی باشند (Wang and Anderson, 1982).

### ۲-۱-۳- مدل ریاضی

مدل‌های ریاضی شامل یک معادله ریاضی هستند، که این معادله ریاضی رفتار متغیرها یا پارامترهای موجود در مدل را توصیف می‌کند. مدل‌های ریاضی به دو صورت تحلیلی و عددی حل می‌شوند. مدل‌های تحلیلی به صورت یک رابطه ریاضی ساده شده تعریف می‌شوند، که این رابطه ریاضی برحسب پارامترهای توصیف‌کننده مدل و ارتباط آنها با یکدیگر بیان می‌شود (دولتی ارده‌جانی و دیگران، ۱۳۸۴).

### ۲-۱-۴- مدل عددی

اکثر مدل‌های تحلیلی همراه با فرض‌هایی هستند که این فرض‌ها باعث می‌شوند مدل‌سازی جامع نبوده و دارای دقت کافی نباشد. برای این که این مشکل پیش نیاید از مدل‌سازی عددی استفاده می‌شود، چون که این مدل‌ها قادر هستند پیچیدگی‌های موجود را در نظر گرفته و نیاز به فرض‌های محدود کننده ندارند. از نقطه نظر ریاضی، در مدل‌سازی عددی معادلات ریاضی حاکم بر مسئله با یک سری معادلات

جبری ساده جایگزین شده، سپس این معادلات به شکل یک ماتریس تغییر یافته و در نهایت متغیر مورد نظر که سیستم تحت مدل‌سازی را توصیف می‌کند، قابل پیش‌بینی بوده و می‌توان مقدار آن را به صورت کمی محاسبه نمود. در مدل‌سازی عددی از روش‌های مختلف استفاده می‌شود. در حالت کلی روش‌های عددی به سه روش تفاضل محدود، اجزاء محدود و حجم‌های محدود تقسیم می‌شود. روش تفاوت‌های محدود قدیمی‌ترین و مهم‌ترین روش در اکثر شاخه‌های مهندسی است و امروزه مدرن‌ترین مدل‌های کامپیوتری هم مربوط به این روش می‌باشد (Wang and Anderson, 1982).

تفاوت روش‌های تحلیلی و عددی این است که جواب روش‌های عددی تقریبی است و این روش‌ها بیشتر پیش‌بینی<sup>۱</sup> می‌کنند در حالی که جواب روش‌های تحلیلی دقیق<sup>۲</sup> است. از تفاوت‌های مهم بین روش‌های عددی و روش‌های تحلیلی این است که روش‌های تحلیلی قادر هستند که در هر نقطه از سیستم، مقدار متغیر یا مجهول<sup>۳</sup> را مشخص کنند، اما روش‌های عددی تنها می‌توانند در یک سری نقاط محدود<sup>۴</sup> و از قبل تعیین شده<sup>۵</sup> از سیستم تحت بررسی، متغیری که سیستم را تشریح می‌کند، محاسبه کنند. بنابر این با فرض امکان تبدیل نقاط بی‌شمار در محیط سیستم به تعداد  $N$  نقطه (قابل شمارش)، می‌توان  $N$  معادله دیفرانسیلی را با  $N$  معادله جبری جایگزین کرد که به آسانی می‌توان با استفاده از تکنیک‌های ریاضی مقدار متغیر مورد نظر را برای  $N$  نقطه مذکور به دست آورد (Patankar, 1985).

## ۲-۱-۵- مدل کامپیوتری

مدل‌های کامپیوتری توسعه یافته مدل‌های عددی هستند و جهت حل معادلات دیفرانسیل حاکم بر

<sup>1</sup> Predict

<sup>2</sup> Exact

<sup>3</sup> Unknown

<sup>4</sup> Finite

<sup>5</sup> Predetermined Points

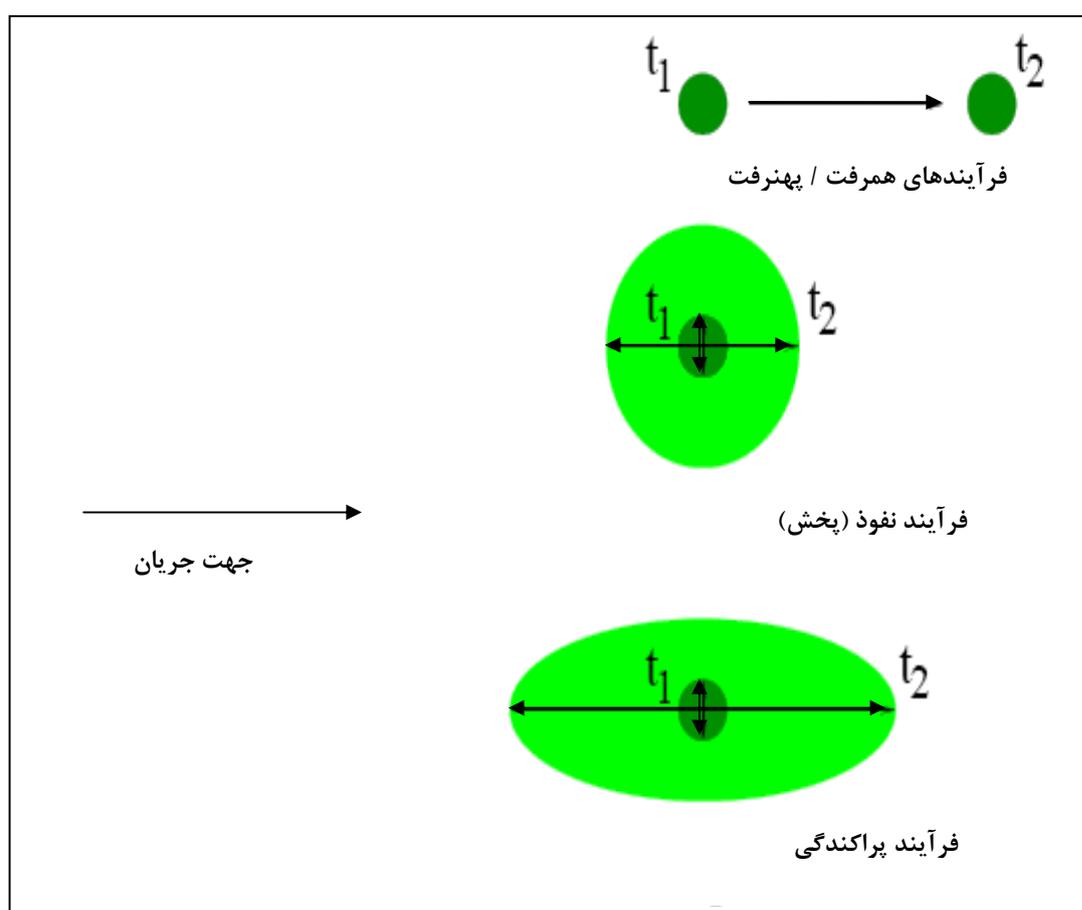
مسائل مهندسی به کار می‌روند. مدل‌های کامپیوتری می‌توانند شامل یک برنامه کامپیوتری باشند که با استفاده از روش‌های تکراری، متغیر یا مجهول را در سیستم معادلات جبری حاصل از روش‌های عددی تخمین می‌زند. مدل‌های کامپیوتری را به دو صورت نرم افزار یا پکیج و یا با کدنویسی می‌توان ساخت. نرم افزارها اکثراً به صورت تجاری به بازار عرضه می‌شوند، اما کدها خروجی‌ها را به صورت اعداد و ارقام نشان می‌دهند. نرم افزارهای پیشرفته حتی این امکان را برای کاربر به وجود می‌آورند که کدهای اضافی را در صورت نیاز در محیط نرم افزار نوشته و به مدل ریاضی اساسی نرم افزار اضافه کنند (مانند نرم افزار PHOENICS و اکثر نرم‌افزارهای تجاری). اکثر نرم افزارها، عبارت‌های اصلی یک معادله را که در انتقال آلاینده‌ها مؤثر هستند، دارا می‌باشند. مدل‌های کامپیوتری پیشرفته مدلهایی هستند که داده‌ها را به آسانی دریافت می‌کنند، به راحتی قابل استفاده باشند و در نهایت خروجی‌ها را به شکل مناسب نمایش دهند. پیشرفت به وجود آمده در روش‌های عددی از یک سو و از سوی دیگر، رشد سریع کامپیوترها و همچنین رشد فهم مدل‌سازی افراد جهت بررسی پیچیدگی‌ها در سیستم‌های مختلف باعث شده است که از روش‌های عددی در حل مسائل و مدل‌سازی پروژه‌های مختلف استفاده شود (Wang and Anderson, 1982).

## ۲-۲- فرآیندهای حاکم بر انتقال آلاینده‌ها<sup>۱</sup>

عوامل حاکم بر مهاجرت یک آلاینده می‌تواند به صورت عبارت‌های مؤثر بر فرآیندهای انتقال، کاهش و رقیق‌سازی غلظت مورد بررسی قرار گیرند. فرآیندهای انتقال می‌تواند به صورت معادلاتی که بر مبنای قوانین جریان استوار هستند، نشان داده شوند. این معادله‌ها می‌توانند به صورت ترکیبی از قانون

<sup>1</sup> Pollutants Transport

بقای جرم و فرآیندهای مربوط به رقیق‌سازی غلظت آلاینده بیان شوند، که در کل این فرآیندها به صورت ضرایبی مانند ضریب نفوذ و سرعت جریان انتقال آلاینده در معادلات دیفرانسیل توصیف کننده انتقال آلاینده وارد می‌شوند. دو فرآیند اصلی حاکم بر انتقال آلاینده‌ها پهنرفت<sup>۱</sup> و پراکندگی<sup>۲</sup> می‌باشد (شکل ۲-۲). پراکندگی اختلاط ظاهری و گسترش آلودگی با سیستم جریان است (Hinkelmann, 2005).

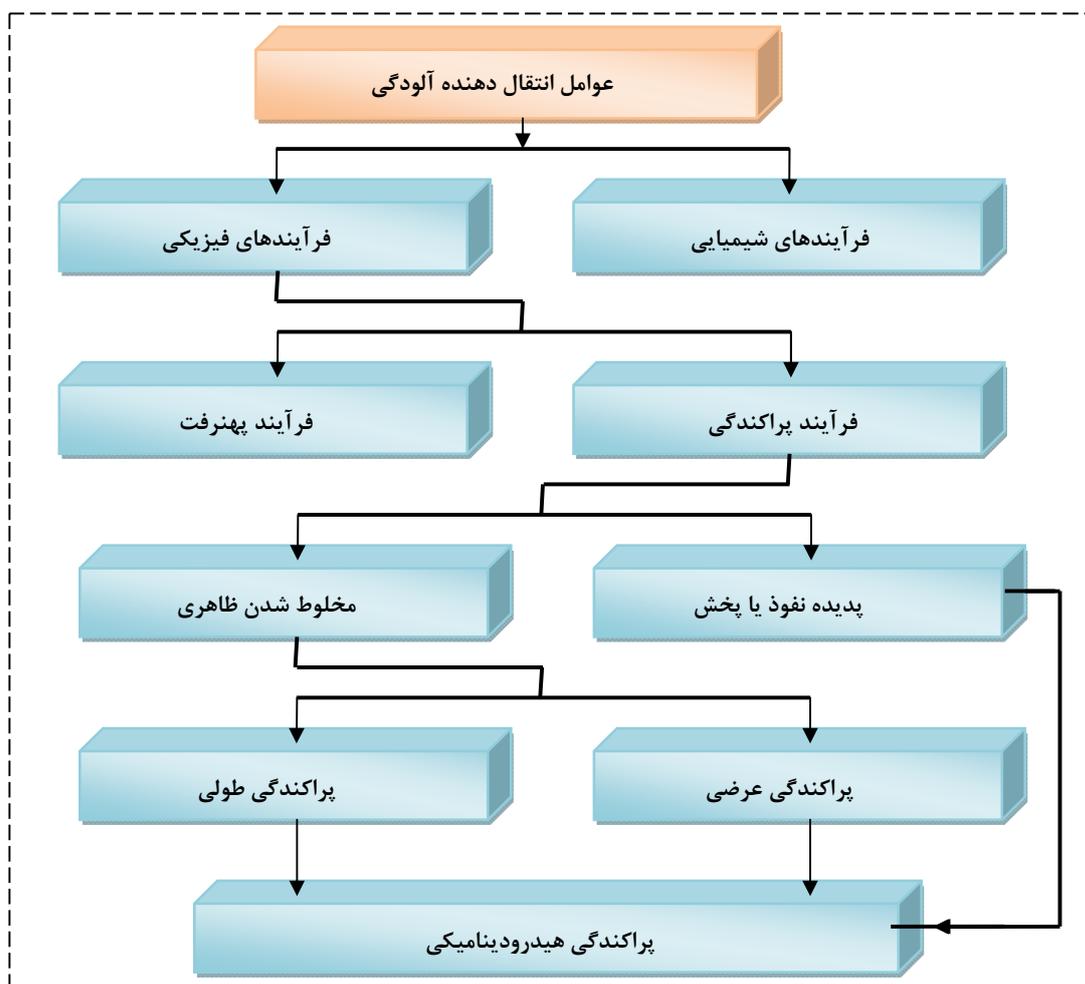


شکل (۲-۲): فرآیندهای اصلی حاکم بر انتقال آلاینده‌ها (Hinkelmann, 2003)

فرآیندها و مکانیسم‌های حاکم بر رقیق شدن و انتقال آلاینده‌ها در آب در شکل (۳-۲) نشان داده شده است.

<sup>1</sup> Advection

<sup>2</sup> Dispersion



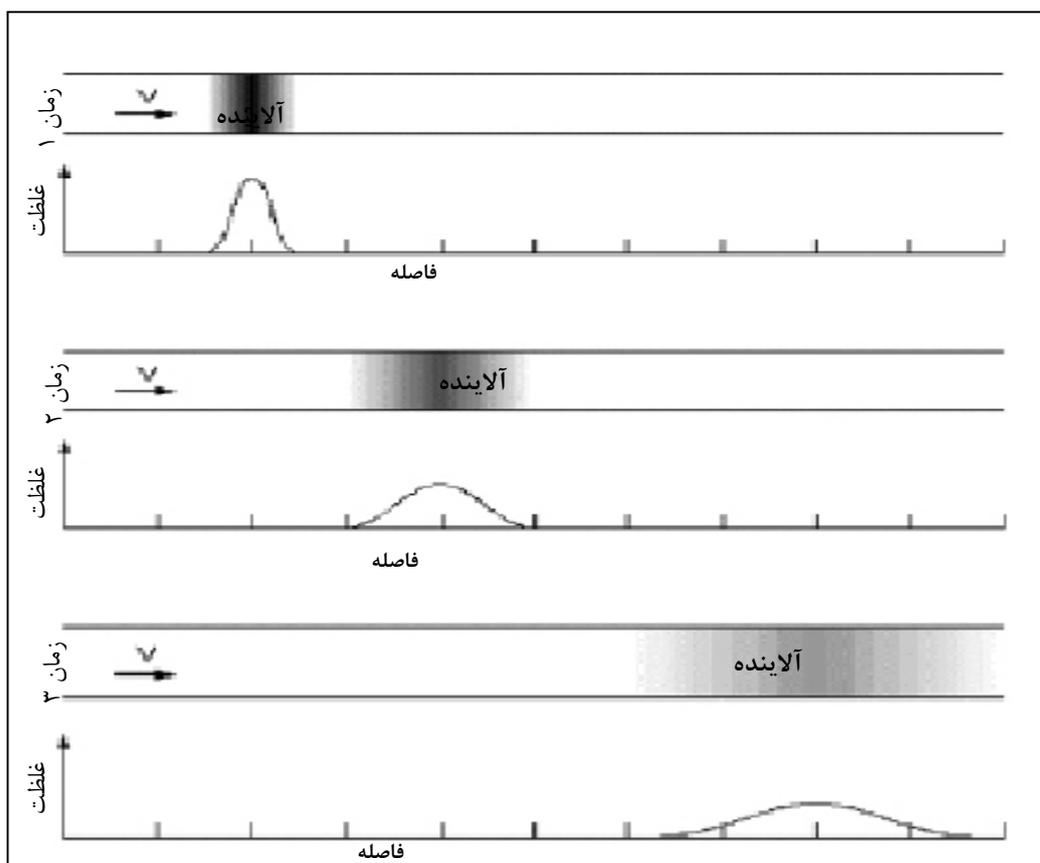
شکل (۲-۳): فرآیندهای درگیر در انتقال، رقیق شدگی و مهاجرت آلاینده‌ها در محیط آبی (دولتی ارده جانی و همکاران، ۱۳۸۴)

با توجه به شکل (۲-۳) می‌توان گفت که عوامل انتقال آلودگی به صورت فیزیکی یا شیمیایی هستند. از فرآیندهای شیمیایی موجود می‌توان به تشکیل کمپلکس، تشکیل رسوب و انحلال، تبادل کاتیونی، فرآیندهای بیولوژیکی و ... اشاره کرد. فرآیندهای فیزیکی به دو دسته پهنرفت و پراکندگی تقسیم می‌شوند. فرآیند پراکندگی خود شامل دو مؤلفه نفوذ<sup>۱</sup> و مخلوط شدن ظاهری است. فرآیندهای پهنرفت و نفوذ را می‌توان با جریان پایای آب در طول یک لوله افقی طویل نشان داد.

<sup>1</sup> Diffusion

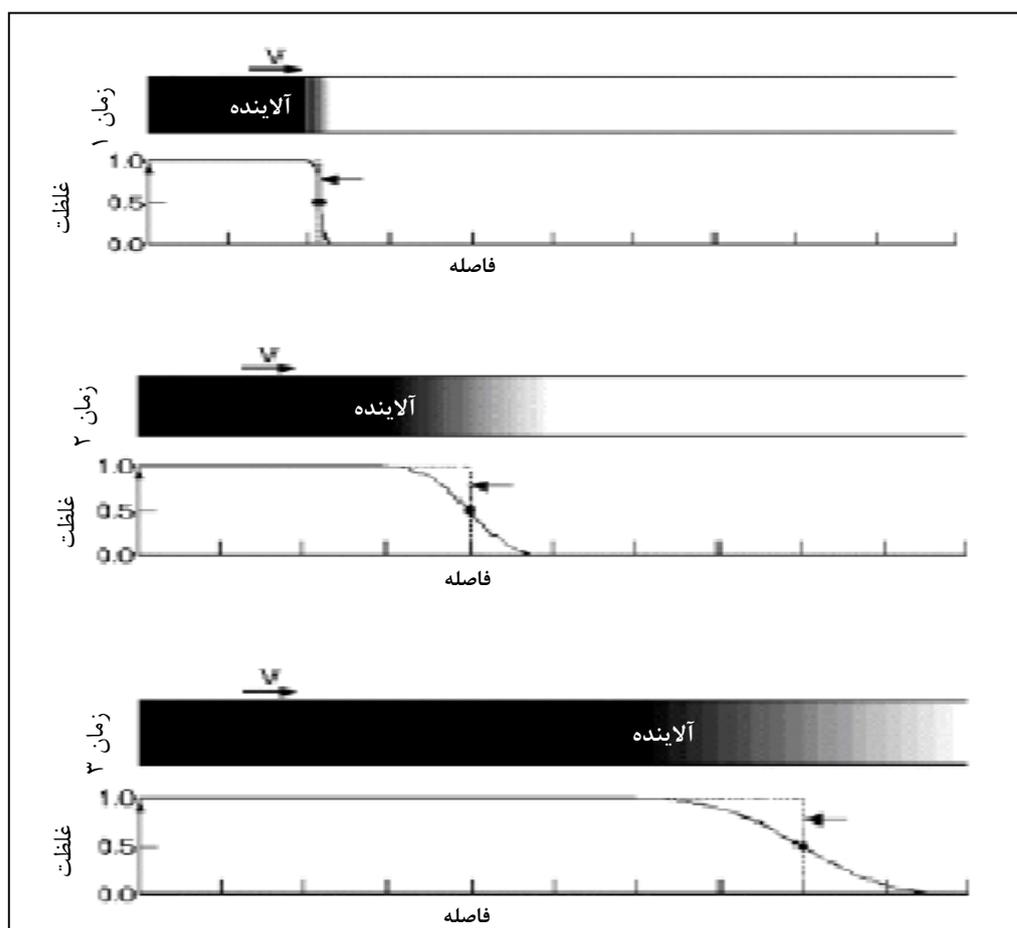
## ۲-۲-۱- پهنرفت

فرآیند پهنرفت انتقال آلاینده با سرعت جریان آب است. در شکل‌های (۲-۴) و (۲-۵) انتقال و رقیق شدن آلودگی تزریق شده به داخل یک لوله نشان داده شده است. اگر انتقال جرم در طول لوله با سرعت  $V$  انجام گیرد. این فرآیند انتقال، پهنرفت نامیده می‌شود. تحت این فرآیند، حرکت ماده هم زمان با حرکت آب انجام می‌شود. مقدار آلاینده در طول استوانه به مقدار زیادی افزایش می‌یابد و سپس به موجب چنین فرآیندی غلظت آن با زمان کاهش می‌یابد. در شکل (۲-۴) انتقال آلاینده به صورت آنی صورت می‌گیرد. همانطور که از نمودارهای غلظت در مقابل فاصله دیده می‌شود، با پیشرفت آلاینده در امتداد لوله، محدوده آلودگی افزایش یافته و بیشینه غلظت کاهش می‌یابد.



شکل (۲-۴): انتقال آلاینده از منبع آنی در جهت جریان آب با سرعت  $V$  (Geoslope International, 2005)

شکل (۵-۲) فرآیندهای انتقال را هنگامی که آلاینده از یک منبع پیوسته به داخل یک لوله تزریق می‌شود به صورت شماتیکی نشان می‌دهد. در نقاط دورتر از محل تزریق، آلاینده در ابتدا با غلظت کم ظاهر شده و سپس به طور تدریجی تا زمانی که دسترسی به آلاینده ممکن است، غلظت آن افزایش می‌یابد. اگر تنها فرآیند پهنرفتن در محیط وجود داشته باشد، آلاینده به شکل لکه‌هایی با غلظت بالا به بعضی از نقاط می‌رسد. به هر حال به دلیل پدیده نفوذ، غلظت کل آلاینده بعداً به طور کامل پخش خواهد شد.

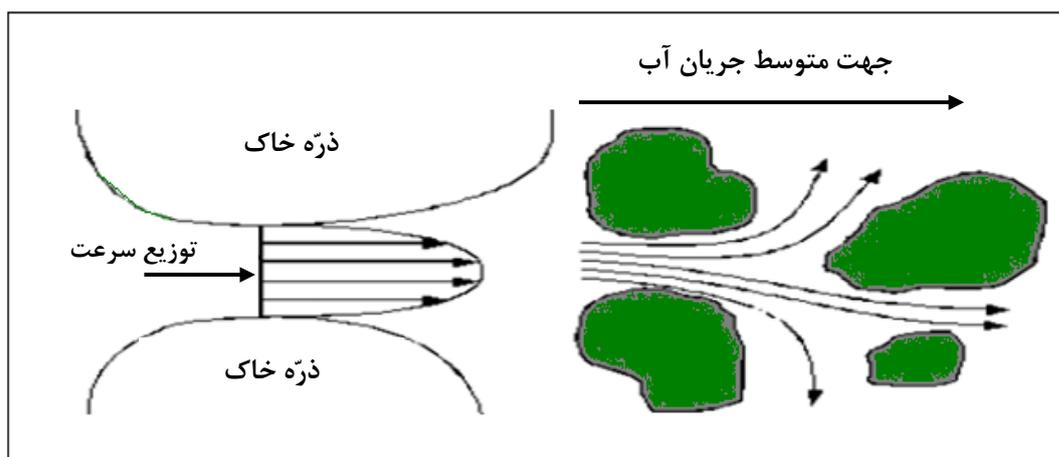


شکل (۵-۲): انتقال آلاینده از یک منبع پیوسته در جهت جریان آب با سرعت  $v$  (Geoslope International, 2005)

تا زمانی که فرآیند پهنرفت به صورت یک عامل مهاجرت ساده در پاسخ به جریان آب در محیط غالب است، مؤلفه پراکندگی دارای تأثیر ناچیزی است (Geoslope International, 2005).

## ۲-۲-۲- پراکندگی

پراکندگی فرآیندی است که به واسطه آن ماده آلاینده محلول رقیق شده و موجب کاهش غلظت آن می‌گردد. فرآیند پراکندگی شامل دو مؤلفه است که یکی مربوط به اختلاط ظاهری و دیگری مربوط به نفوذ مولکولی است. مؤلفه اختلاط ظاهری غالباً پراکندگی مکانیکی نامیده می‌شود، که ناشی از تغییرات سرعت در یک محیط متخلخل است. همانگونه که در شکل (۲-۶) نشان داده شده است، تغییرات سرعت در سطوح میکروسکوپی به دلیل اصطکاک بین ذرات خاک و سیال و همچنین به دلیل انحنای مسیرهای جریان است. این تغییرات غلظت، در نتیجه تغییرات سرعت است. نفوذ مولکولی در نتیجه گسترش آلاینده در اثر گرادیان غلظت است. این فرآیندها هنگامی که مؤلفه سرعت تراوش در محیط ناچیز است اتفاق می‌افتد (دولتی ارده‌جانی و دیگران، ۱۳۸۴).



شکل (۲-۶): عوامل به وجود آورنده پراکندگی مکانیکی (Lagrega et al., 1994).

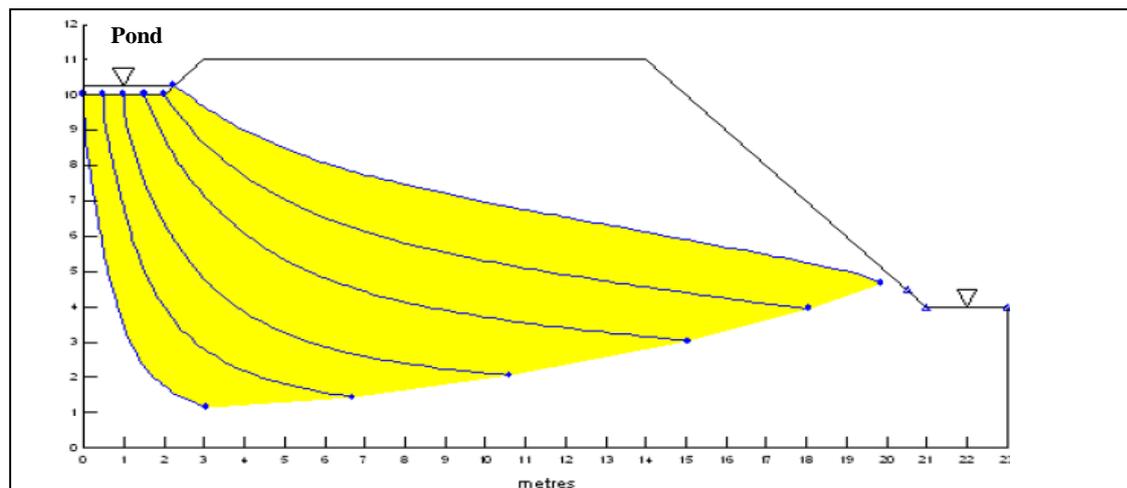
## ۲-۲-۳- فرآیندهای رقیق‌سازی آلاینده

آلاینده مهاجرت کننده در یک محیط به دلیل واکنش‌های شیمیایی که در طول انتقال روی می‌دهد، رقیق می‌شود. این واکنش‌ها می‌تواند میان جرم آلاینده و مایع منفذی روی دهد. در طول این واکنش‌ها، فرآیند جذب به عنوان اصلی‌ترین فاکتور رقیق‌ساز در حین انتقال آلاینده دلالت دارد. فرآیند جذب باعث جدا شدن آلاینده از آب، کاهش غلظت محلول و همچنین کاهش تحرک آن می‌شود. میزان جذبی که اتفاق می‌افتد، تابعی از غلظت آلاینده در محیط است. این ارتباط بوسیله تابع ایزوترم جذب که وابسته به میزان غلظت جذب شده است، تعریف می‌شود. در کل، ویژگی‌های جذب یک آلاینده در خاک بوسیله تابعی از  $S$  در مقابل  $C$  نشان داده می‌شود، که  $S$  جرم آلاینده جذب شده به ازای واحد جرم ذرات خاک و  $C$  غلظت آلاینده در محیط سیال است. در این تابع خطی، مقدار شیب، ضریب توزیع<sup>۱</sup> ( $K_d$ ) نامیده می‌شود.  $K_d$  نشان دهنده شیب در بین قسمت‌های جامد (ذرات خاک) و فازهای مایع موجود در محیط است (Sheng and Smithe, 1997).

با توجه به آنچه گفته شد، انتقال آلاینده‌ها در خاک‌ها هم شامل فرآیند پهنرفت و پراکندگی می‌باشد. در یک فرآیند انتقال آلاینده، غالباً در نظرگرفتن انتقال آلاینده از طریق پهنرفت به صورت مجزا و بدون اینکه هیچ داده اضافی وارد شود، بسته به محیط، سودمندتر است و همچنین در این حالت نیازی به محاسبات مربوط به مؤلفه پراکندگی نیست. برای درک بهتر در شکل (۲-۷) مثالی از فرآیند جریان ذرات ردیاب نشان داده شده است. برای هر گام زمانی ذرات در فضاهای خالی متناسب با سرعت جریان آب و اندازه گام زمانی حرکت می‌کنند. مسیرهای جریان ذرات یک نمایش گرافیکی از حرکت توده<sup>۲</sup> یا جبهه آلودگی به دلیل انتقال کامل از طریق پهنرفت ارائه می‌دهد. تأثیرات پراکندگی، جذب، تجزیه (واپاشی) و چگالی در فرآیند انتقال ذرات در نظر گرفته نشده است.

<sup>1</sup> Distribution Coefficient

<sup>2</sup> Plume



شکل (۷-۲): آنالیز ذرات یک آلاینده در جریان عبوری از یک محیط متخلخل (Geoslope International, 2005)

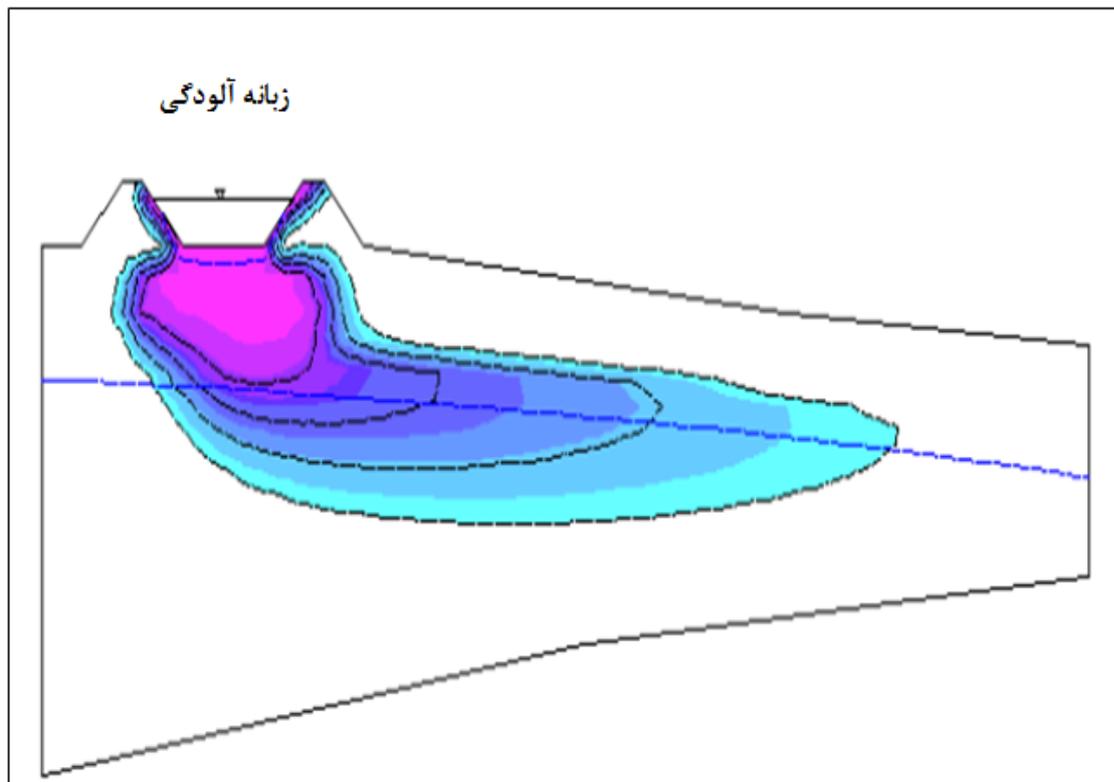
در فرآیند جریان ذرات ردیاب، املاح حل شده نشان دهنده ذرات هستند. در این حالت کمی کردن شدت پهنرفت جریان به عنوان یک تحلیل اولیه از انتقال آلاینده سودمند است.

## ۲-۲-۴- پراکندگی هیدرودینامیکی<sup>۱</sup>

در بسیاری از تحلیل‌های واقعی، اثرات پراکندگی هیدرودینامیکی در نظر گرفته می‌شود. پراکندگی هیدرودینامیکی آلاینده‌ها به دلیل رقیق شدن آلاینده‌ها، هم به صورت طولی (در جهت جریان آب) و هم به صورت اریب (عمود بر جهت جریان) است. رقیق شدن آلاینده به دلیل پراکندگی، مؤلفه قابل توجهی از انتقال آلاینده را در بر گرفته و معمولاً نمی‌توان از آن صرف‌نظر کرد. در شکل (۸-۲) هم مثالی از تحلیل‌های پهنرفت-پراکندگی مهاجرت آلاینده از سطح یک تالاب<sup>۲</sup> تشکیل شده در پشت یک سد باطله به صورت شماتیک نشان داده شده است.

<sup>1</sup> Hydrodynamic Dispersion

<sup>2</sup> Pond



شکل (۲-۸): انتقال آلاینده از سطح یک سد باطله به داخل آب زیرزمینی (Geoslope International, 2005)

## ۲-۳- آلاینده‌های فلزی

فلزات کمیاب دارای منشاءهای مختلف بوده و باعث آلودگی‌های زیست محیطی می‌شوند و شامل فلزات آلومینیم، آرسنیک، باریوم، بریلیوم، بور، کادمیم، کرم، کبالت، مس، سرب، لیتیم، منگنز، جیوه، مولیبدن، نیکل، سلنیم، نقره، استرانسیم، توریم، قلع، تیتانیم، اورانیم، وانادیم و روی می‌باشد (دولتی ارده‌جانی و دیگران، ۱۳۸۴). در مناطق معدنی مشکلاتی از قبیل زهاب‌های اسیدی معدن و آلودگی توسط فلزات سنگین به عنوان مشکلات عمده آلودگی آب‌ها شناخته شده است (Williams, 1975).

## ۲-۴- مکانیسم‌های انتقال آلاینده‌های فلزی در محیط آبی

غلظت‌های بالای یون‌های فلزی معمولاً همراه pH پایین مشاهده می‌شوند. پایین بودن مقدار pH سبب انحلال و تشدید تحریک اغلب یون‌های فلزی می‌گردد و این یون‌ها به صورت محلول توسط آب‌های زیرزمینی و سطحی مهاجرت کرده و در اثر افزایش pH رسوب می‌کنند (دولتی ارده‌جانی و دیگران، ۱۳۸۴). مکانیسم‌های حاکم در انتقال آلاینده‌های فلزی به محیطی که آلاینده در آن منتقل می‌شود بستگی دارد.

محیطی که یک آلاینده فلزی در آن منتقل می‌شود، می‌تواند دو ویژگی زیر را داشته باشد:

- محیطی که در آن مقدار سرعت جریان نسبت به ضریب پراکندگی خیلی بزرگتر است.

- محیطی که در آن مقدار ضریب پراکندگی (یا پخش) نسبت به سرعت جریان خیلی بزرگتر است.

در واقع در محیط اول که مؤلفه سرعت غالب است، مکانیسم انتقال به این صورت است که آلاینده فلزی از یک نقطه به نقطه دیگر منتقل می‌شود (پهنرفت) و در حین انتقال ممکن است که مقداری از آلاینده مذکور در اثر هر نوع عامل جذبی (مانند یک عبارت مصرف ناشی از جذب بیولوژیکی یون‌های آهن دو ظرفیتی) از محیط محلول حذف گردد. در مورد محیط اول می‌توان گفت که محیط یک رودخانه به طور کامل گویای این محیط می‌باشد.

در محیط دوم که مؤلفه پراکندگی غالب است، مکانیسم انتقال آلاینده فلزی به این صورت است که در اثر گرادیان غلظت ناشی از اختلاف غلظت بین دو نقطه (یون‌های فلزی) به سادگی در محیط پخش می‌شوند (پخش یا نفوذ). محیط درون یک تالاب تصفیه زهاب اسیدی که جریان زهاب در آن بسیار کند می‌باشد، با ورود زهاب به داخل تالاب در اثر اختلاف غلظت آلاینده‌های فلزی در نقاط مختلف پدیده نفوذ حتماً روی می‌دهد که این می‌تواند مثالی از محیط دوم باشد.

فصل سوم

**روش عددی حجم‌های محدود و  
مدل‌سازی با نرم‌افزار PHOENICS**

## ۳-۱- مقدمه

امروزه روش حجم‌های محدود رایج‌ترین روش در دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) است. استفاده از CFD برای پیش‌بینی جریان‌های داخلی و خارجی در دهه گذشته پیشرفت چشم‌گیری داشته است. در دهه ۱۹۸۰ حل مسائل جریان سیال توسط CFD موضوع حوضه تحقیقات بسیاری از متخصصین شبیه‌سازی که چندین سال به طور اصولی دوره دیده‌اند در آمده است. قابلیت وسیع موقعیت‌های کاری مهندسی توأم با الگوریتم‌های حل مؤثر و پیشرفته‌شدن امکانات پیش‌پردازنده و پس‌پردازنده که در ادامه معرفی می‌شوند، امکان استفاده از برنامه‌های CFD تجاری را برای مهندسين به منظور تحقیق، توسعه و طراحی در صنعت فراهم کرده است. در حالی که کاربرد برنامه‌های تجاری CFD بر اساس حجم‌های محدود اخیراً رو به ضعف و نزول می‌باشد، بازار به طور مستمر در اختیار چهار برنامه PHOENICS، FLUENT، STAR-CD و FLOW3D قرار گرفته است که همه آنها بر اساس روش حجم‌های محدود می‌باشد (Patankar, 1985).

در زمینه مدل‌سازی تحول و انتقال آلاینده‌های فلزی در سیستم جریان آب سطحی می‌توان از نرم‌افزارهای مختلفی استفاده نمود. یکی از توان‌مندترین نرم‌افزارهای CFD جهت مدل‌سازی بسیاری از مسائل مهندسی، نرم‌افزار PHOENICS است. نرم‌افزار PHOENICS این قابلیت را برای کاربر فراهم می‌آورد تا بتوان کدنویسی‌های لازم را جهت اعمال هرگونه شرایط مرزی، عبارات تولید و مصرف آلاینده‌ها ناشی از واکنش‌های شیمیایی ضمن انتقال فیزیکی آلاینده‌ها در نظر گرفت. بدون شک PHOENICS نرم‌افزاری بسیار مناسب برای اهداف مختلف است که خروجی‌ها و نتایج این نرم‌افزار به خوبی قابل ارائه هستند. در یک مدل‌سازی با استفاده از ابزار CFD انجام مراحل زیر ضروری می‌باشد:

- گسسته‌سازی حجم‌های محدود برای پدیده‌های مهم انتقال در جریان سیال شامل: نفوذ، جابجایی و عبارتهای تولید و مصرف.

- به کارگیری روش‌های گسسته برای پدیده‌های غیر دائم.
  - انجام فرآیندهای حل تکرار برای حصول ارتباط صحیح بین متغیرهای جریان.
  - الگوریتم‌های حل سیستم‌های مربوط به معادلات گسسته.
  - اعمال شرایط مرزی.
- همچنین الگوریتم کار در روش حجم‌های محدود شامل سه مرحله به صورت زیر می‌باشد:
- I- انتگرال‌گیری کلی معادلات حاکم بر جریان سیال روی تمام حجم‌های کنترل مربوط به میدان حل؛
  - II- گسسته‌سازی شامل جایگذاری نوعی از تقریب‌های اختلاف محدود برای عبارتهای داخل معادله انتگرالی که فرآیندهای جریان مانند جابجایی، نفوذ و منبع‌ها را نشان می‌دهد، این عمل معادلات انتگرالی را به یک سیستم معادلات جبری تبدیل می‌کند؛
  - III- حل معادلات جبری با استفاده از یک روش تکرار (Versteeg and Malasekera, 1995).

### ۳-۲- دینامیک سیالات محاسباتی و نرم‌افزار PHOENICS

دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) ابزاری است که با استفاده از آن، شبیه‌سازی کامپیوتری برای پیش‌بینی انتقال آلاینده‌ها در محیط آبی انجام می‌گیرد. برای پیش‌بینی مسیری که سیال جریان می‌یابد و تحلیل آماری جریان سیال، معادلات جریان سیال فرمول‌بندی می‌شوند. کدهای CFD قادر هستند این روابط را با روش‌های عددی حل نمایند. برای ایجاد یک روش حل مناسب، این معادلات با استفاده از تکنیک‌های گسسته‌سازی از قبیل روش‌های تفاوت محدود، اجزاء محدود و حجم‌های محدود به یک قالب عددی مناسب تبدیل می‌شوند. کدهای CFD تجاری بطور گسترده با مجموعه‌ای از ویژگی‌های مخصوص به خود که با مسائل جریان سیال همراه می‌باشند، در دسترس می‌باشند. مقایسه‌ای از برخی کدهای تجاری CFD توسط ادوارد و همکارانش در سال ۱۹۹۵ ارائه شده است (جدول ۳-۱). همان‌گونه که از

جدول (۱-۳) می‌توان فهمید، کاربرد نرم‌افزار PHOENICS در صنعت معدنکاری ناشناخته بود، قابل ذکر است که دولتی ارده‌جانی و همکاران در سال ۲۰۰۳ یک مورد از کاربردهای این نرم‌افزار را جهت پیش‌بینی آلودگی ناشی از اکسایش پیریت در باطله‌های پرکننده معادن زغال‌نواری روباز انجام داده‌اند (Doulati Ardejani, 2004b).

جدول (۱-۳): مقایسه تعدادی از کدهای CFD (Edwards et al., 1995)

ویژگی‌ها	FLUENT	PHOENICS	FLOW3D	FIDAP
روش‌های گسسته‌سازی	حجم‌های محدود	حجم‌های محدود	حجم‌های محدود	حجم‌های محدود
مدل‌سازی جریان قابل تراکم و مدل‌سازی جریان چند فازی	فراهم شده	فراهم شده	فراهم شده	توسط کاربر رابطه حالت تعیین می‌شود.
ظرفیت سطح آزاد	فراهم نشده	فراهم شده	دارای محدودیت	فراهم شده
تولید مش	مش نامنظم	مش منظم، مش اصلاحی، انطباق بدنه با مختصات کارتیزین / استوانه‌ای	مش منظم، مختصات کارتیزین / استوانه‌ای، مختصات دوار، چند بلوکه	مش نامنظم
توسعه‌پذیری کد	امکان پذیر نیست.	امکان نوشتن کد FORTRAN وجود دارد.	امکان نوشتن کد FORTRAN وجود دارد.	امکان نوشتن کد FORTRAN وجود دارد.
کاربردها	مهندسی فرآیند و شیمی، انتقال حرارت، کنترل آلودگی و طراحی معماری	حرارت و تهویه، مهندسی، مطالعات ژئوفیزیکی، کنترل آلودگی، سرد کردن لوازم الکتریکی، انتقال حرارت و صنعت نفت و مهندسی محیط زیست	مدل‌سازی احتراق و آتش، آیرودینامیک، ایمنی ساحل، مهندسی مکانیک، انتقال حرارت	خودرو، الکترونیک و نیمه رساناها، شیمی، جو زمین / استحکامات
کاربردهای معدنی	بله	بله	بله	بله

PHOENICS یک بسته نرم‌افزاری برای مقاصد عمومی است که برای پیش‌بینی کمی در موارد ذیل استفاده می‌شود:

✓ چگونگی جریان سیالات (هوا، آب، نفت و ...) در اطراف و درون موتور، تجهیزات فرآیندی،

ساختمان‌ها، عوارض محیط طبیعی و ... ،

✓ تغییرات همراه با ترکیب شیمیایی و فیزیکی،

✓ تنش‌های همراه در اجسام غوطه‌ور و ... ،

از کاربردهای PHOENICS می‌توان به طراحی تجهیزات، طراحی ساختمان‌ها و معماری، پیش‌بینی اثرات زیست محیطی آلاینده‌ها و خطرات ناشی از آنها، مسائل مربوط به سیستم‌های تهویه، بررسی تنش در انواع سازه‌ها با توجه به نوع کاربرد و شبیه‌سازی مسائل احتراق اشاره کرد.

### ۳-۲-۱- عملیات‌های اصلی در نرم‌افزار PHOENICS

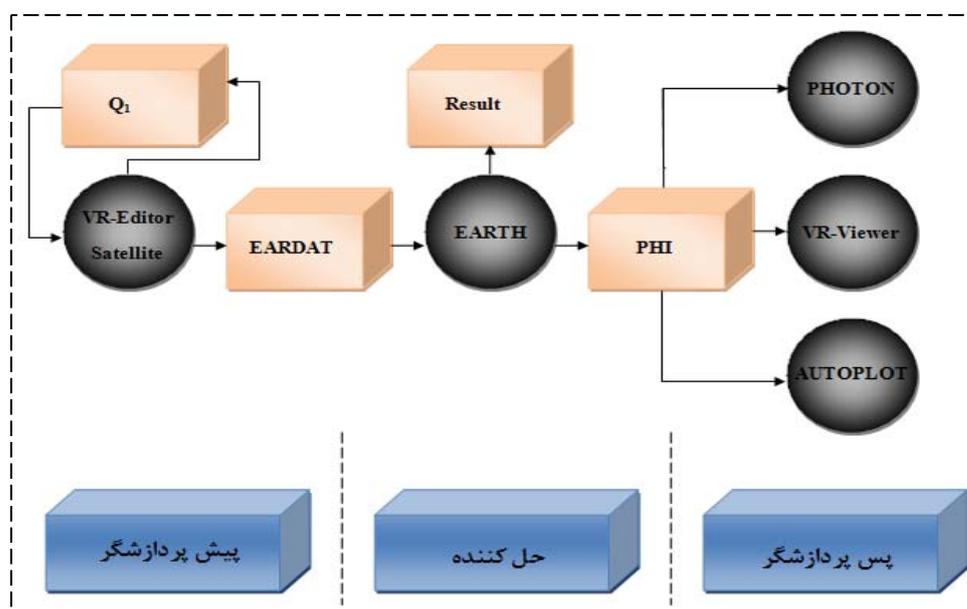
نرم‌افزار PHOENICS سه عمل اصلی زیر را انجام می‌دهد:

✓ تعریف مسأله (که در آن کاربر میدانی را که باید شبیه‌سازی کند و سؤالاتی را که می‌خواهد پاسخ دهد، تعریف می‌کند)،

✓ شبیه‌سازی (معادلات اساسی حاکم بر مسأله با اعمال شرایط مرزی مناسب به روش عددی حجم-های محدود حل می‌گردند)،

✓ نمایش نتایج محاسبه (به وسیله نمایش گرافیکی، جداول اعداد و ...).

یک طرح شماتیکی از سه عمل اصلی PHOENICS یعنی، پیش‌پردازنده (تعریف مسأله)، حل‌کننده (شبیه‌ساز) و پس‌پردازنده (نمایش نتایج) در شکل (۳-۱) نشان داده شده است.



شکل (۱-۳): طرح شماتیکی از سه عمل اصلی نرم افزار PHOENICS (اقتباس از CHAM, 2008)

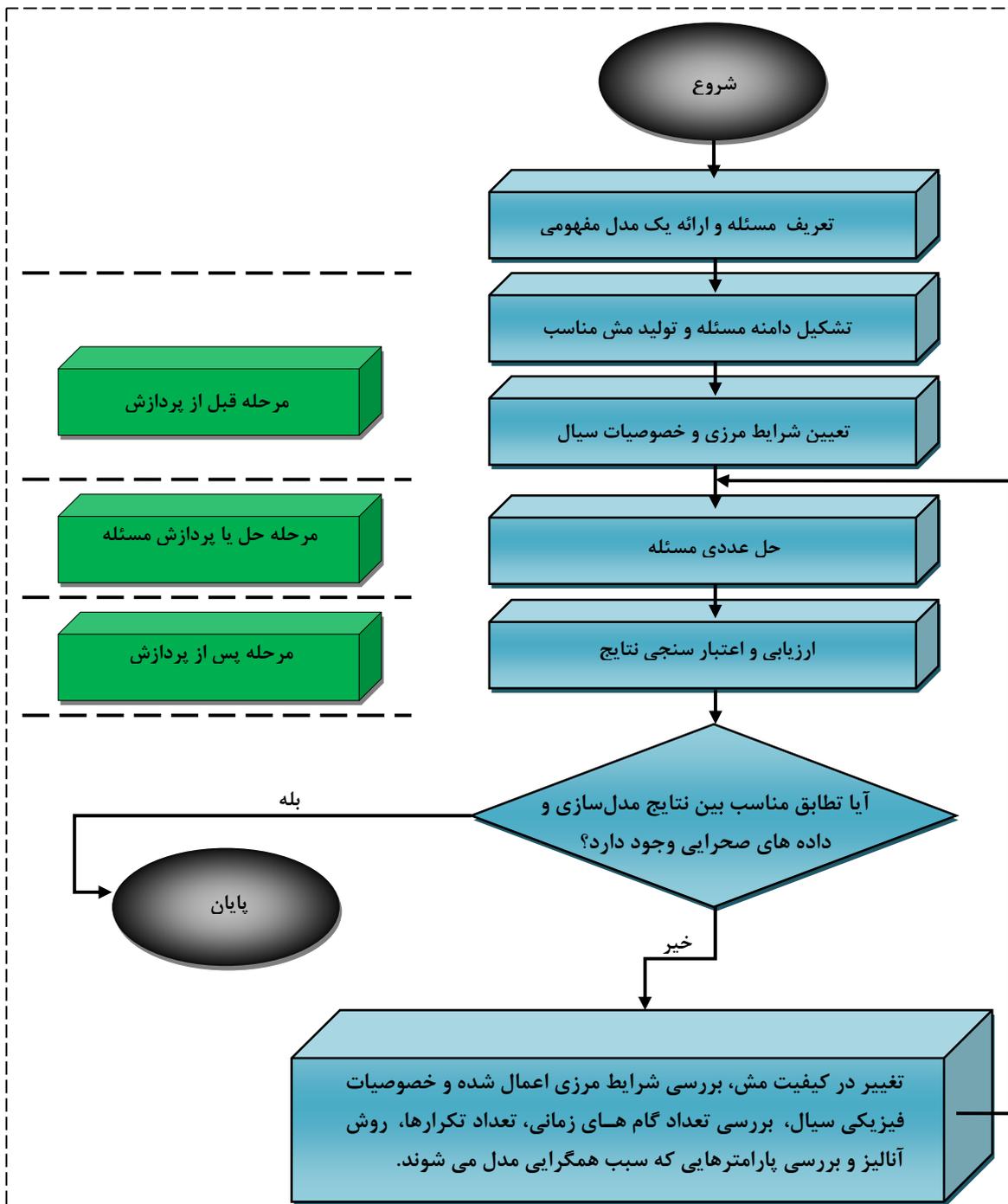
### ۳-۲-۲- تعریف مسأله در PHOENICS

تعریف مسأله شامل بیان وضعیت هندسه (یعنی شکل‌ها، اندازه‌ها و موقعیت‌های اشیاء و فضاهای تداخل)، مواد (یعنی ترمودینامیک، انتقال و دیگر ویژگی‌های سیالات و جامدات درگیر)، فرآیندها (آیا مواد بی‌اثر یا واکنش‌پذیر هستند؟، آیا جریان غیر آرام و متلاطم شبیه‌سازی می‌شود؟ و اگر چنین است به وسیله چه مدلی؟، آیا انتقال حرارت در سیالات و جامدات محاسبه می‌شود؟ و آیا وضعیت تنش‌ها در جامدات محاسبه می‌گردند؟)؛ شبکه (یعنی روش و دقت در تقسیم فضا و زمان که گسسته‌سازی نامیده می‌شود)، دیگر پارامترهای عددی متأثر کننده سرعت، دقت و ... (یعنی پارامترهای غیرفیزیکی).

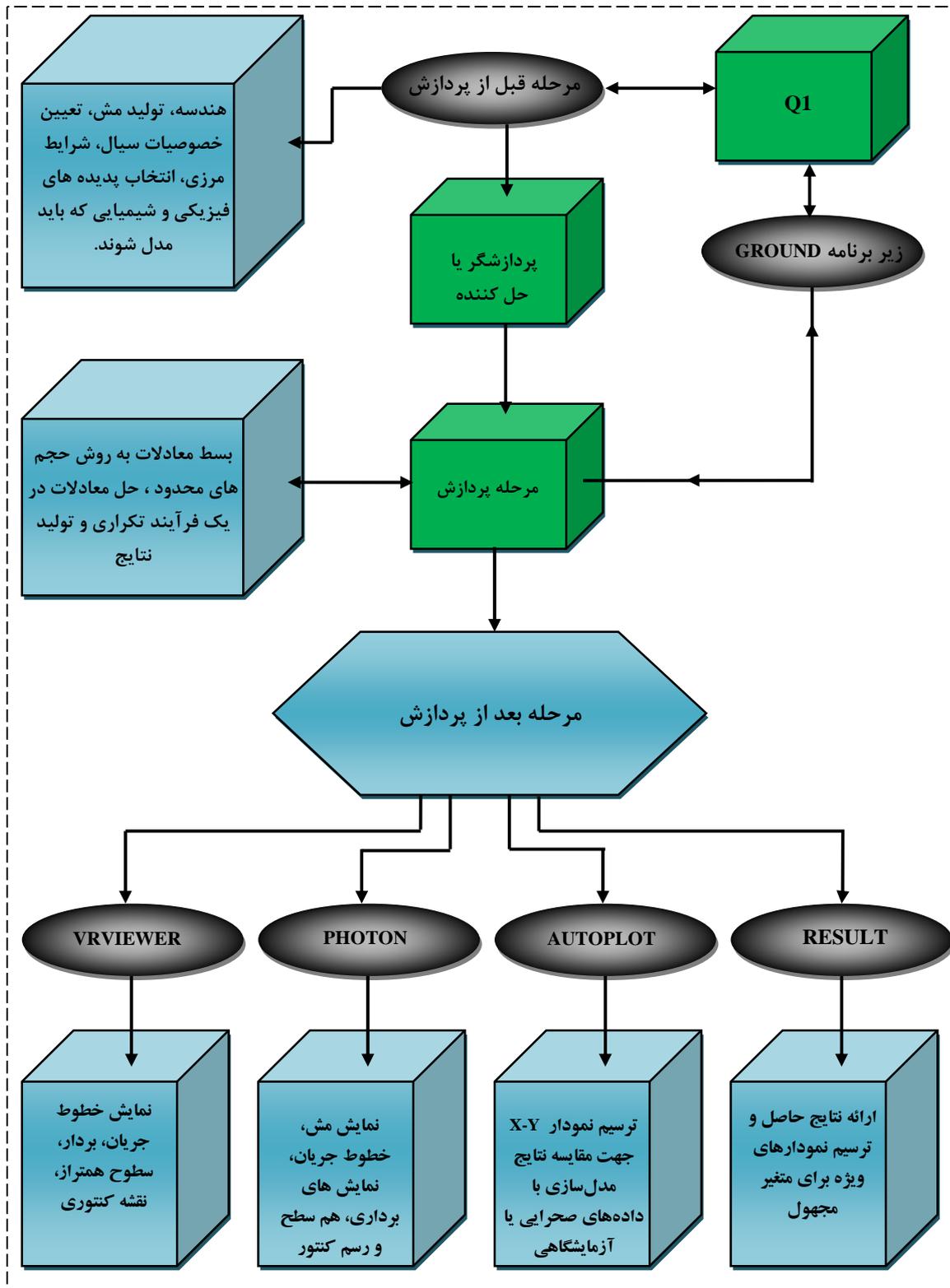
نرم افزار PHOENICS در حقیقت زبان ورودی سطح بالای خودش به نام PIL<sup>۱</sup> را دارد که در آن فایل‌های Q1 نوشته می‌شوند. PIL یک زبان مستقیماً تفسیر شده است و به هیچ زبان کمکی مترجم یا کد کمکی نیاز ندارد. PIL توانمندترین و انعطاف‌پذیرترین زبان ورودی تعبیه شده برای تنظیم مسائل مرتبط با CFD است. در شکل‌های (۲-۳) و (۳-۳) به ترتیب فلوجارت انجام فازهای اصلی در آنالیزهای

<sup>۱</sup> PHOENICS Input Language

CFD و مراحل حل مسأله توسط نرم‌افزار PHOENICS به عنوان یک نرم‌افزار CFD مناسب و انعطاف‌پذیر نشان داده شده است.



شکل (۲-۳): فلوچارت انجام فازهای اصلی در آنالیزهای CFD (Doulati Ardejani et al., 2004a)



شکل (۳-۳): مراحل حل مسأله توسط نرم‌افزار PHOENICS (Doulati Ardejani et al., 2004a)

## ۳-۲-۳- معادله حاکم بر نرم‌افزار PHOENICS

در تمامی شبیه‌سازی‌های PHOENICS، رابطه دیفرانسیلی زیر حل می‌شود (CHAM, 2008):

$$\frac{\partial}{\partial t}(r_i \rho_i \phi_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( r_i \rho_i u_{ji} \phi_i - r_i \Gamma_{\phi_i} \frac{\partial \phi_i}{\partial x_j} \right) = r_i S_{\phi_i} \quad (1-3)$$

که عبارات  $\frac{\partial}{\partial t}(r_i \rho_i \phi_i)$ ،  $r_i \rho_i u_{ji} \phi_i$ ،  $r_i \Gamma_{\phi_i} \frac{\partial \phi_i}{\partial x_j}$  و  $r_i S_{\phi_i}$  به عنوان فرآیندهای تغییر زمانی ذخیره، پهنرفت

(مؤلفه سرعت)، نفوذ و مؤلفه تولید/ مصرف ارائه شده‌اند که در آنها:

$$\phi_i = \text{هر متغیر وابسته فاز؛}$$

$$t = \text{زمان؛}$$

$$r_i = \text{درصد حجم فاز } i؛$$

$$\rho_i = \text{چگالی فاز } i؛$$

$$u_{ji} = \text{مؤلفه سرعت در جهت } X_i؛$$

$$\Gamma_{\phi_i} = \text{ضریب تغییر نفوذ برای متغیر } \phi \text{ در فاز } i؛$$

$$S_{\phi_i} = \text{نرخ منبع } \phi_i^1.$$

در حالتی که مسأله تک فازی باشد، درصد حجم یعنی  $r_i$  از روابط حذف می‌گردد و در این حالت معادله

حاکم به صورت زیر ساده می‌گردد:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho u_{j\phi} - \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) = S_{\phi} \quad (2-3)$$

<sup>1</sup> Source rate

### ۳-۳- اعمال شرایط مرزی و عبارات‌های تولید<sup>۱</sup> در محیط نرم‌افزار PHOENICS

در این قسمت شیوه اعمال شرایط مرزی و عبارات تولید (منبع تولید آلاینده) در محیط نرم‌افزار PHOENICS توضیح داده شده است. جزئیات کلی شرایط مرزی و یا منابع‌های تولید و مصرف به طور کامل در راهنمای نرم‌افزار در قسمت‌های PHOENICS Encyclopedia, Satellite و TR/200 به شکلی ساده موجود است. فرض می‌شود که دیواره‌ها و لبه‌های میدانی که تعریف می‌شود غیر قابل نفوذ، بدون اصطکاک و بی‌دررو است و این مطلب نشان دهنده تقارن صفحات و محورها است (CHAM, 2008).

#### ۳-۳-۱- شرایط داخلی، مرزی و منابع‌های میدان

معادلات دیفرانسیل را باید قبل از حل توسط شرایط مرزی تکمیل نموده و سپس حل نمود. شرایط مرزی زمانی که برای مسائل جریان سیال و انتقال حرارت مطرح می‌شود، اطلاعات لازم مربوط به مقدار جریان ورودی به میدان را اعمال می‌کند (مانند غلظت یک آلاینده در ورودی یا میزان دما در دیواره‌های یک مدل). جریان ممکن است نه تنها در مرزهای خارجی میدان بلکه در نقاط داخلی، وارد و یا از آنها خارج شود. نرم‌افزار PHOENICS هیچ‌گونه تمایزی بین شرایط داخلی و مرزی، یا این دو با منابع‌ها قائل نیست، بنابراین از یک قالب از پیش تعریف شده در این نرم‌افزار استفاده می‌شود (CHAM, 2008).

#### ۳-۳-۲- رفتار شرایط مرزی در PHOENICS

در PHOENICS شرایط مرزی و منابع‌ها برای متغیر  $\phi$  ( $S_\phi$ ) در سمت راست معادلات دیفرانسیل

<sup>۱</sup> Source terms

اعمال به صورت رابطه (۳-۳) وارد می‌شوند:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial X_k} \left( \rho U_k \phi - \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial X_k} \right) = S_\phi + S_{bc1} + S_{bc2} + \dots + S_{bcn} \quad (3-3)$$

که در آن:

$S_\phi$  به طور قراردادی نشان دهنده عبارت‌های منبعی از قبیل ترم‌های گرادیان فشار و لزجت گرمایی و یا سینتیک جذب یک آلاینده در محیط آبی است، که در داخل بخش EARTH وجود دارد.  $\Gamma_\phi$  نشان دهنده ضریب تبادل پخش یا نفوذ متغیر  $\phi$  می‌باشد.  $S_{bc1}$ ،  $S_{bc2}$  و ... نشان دهنده شرایط مرزی مختلف می‌باشد و این شاید تنها نشان دهنده قسمت مشخصی از میدان باشد (CHAM, 2008).

### ۳-۳-۳- معادلات جبری

معادلات دیفرانسیل مربوط به حجم کنترلی با استفاده از روش حجم‌های محدود به طور کامل و دقیق حل شده است. تابع اولیه یا شکل اولیه شرط مرزی به صورت رابطه خطی (۳-۴) نشان داده شده است:

$$S_{bc} = TC(V - \phi) \quad (4-3)$$

که در آن:

$S_\phi$  = یک منبع تولید یا عبارت مصرف در هر نقطه از فضای مدل،

$T$  = ضریب هندسی، که مقدار آن به مدلی که در نرم افزار ساخته می‌شود وابسته است.

$C^1 =$  ضریب؛ انتخاب مناسب مقدار  $C$  یا ضریب برای اعمال شرط مرزی با توجه به آن شرط مرزی انجام می‌گیرد.  $C$  می‌تواند ثابت یا به صورت یک تابع بیان و اعمال گردد. در صورتی که  $C$  تابعی از متغیر توصیف‌کننده مدل باشد با کدنویسی مناسب در زبان فورترن می‌توان آن را اعمال کرد.

$V^2 =$  مقدار؛ انتخاب مناسب مقدار  $V$  یا ضریب هم برای اعمال شرط مرزی با توجه به آن شرط مرزی انجام می‌گیرد.  $V$  نیز می‌تواند ثابت یا به صورت یک تابع بیان و اعمال گردد. اگر  $V$  تابعی از متغیر توصیف‌کننده مدل باشد با استفاده از کدنویسی مناسب به زبان فورترن می‌توان آن را اعمال کرد.

$\phi =$  متغیری که رفتار آن با استفاده از مدل‌سازی بررسی می‌شود.

معادلات دیفرانسیلی گسسته‌شده مربوط به حجم کنترلی میدان برای هر سلول فرضی  $P$  در میدان

مذکور دارای معادله جبری (۵-۳) است:

$$a_p \phi_p = \sum_{N,S,E,W,H,L,T} a_k \phi_k + S_\phi + \sum_{Patches} TC (V - \phi_p) \quad (5-3)$$

### ۳-۳-۴- ترم یا عبارت منبع

به عنوان دستاوردی از فرآیند انتگرال‌گیری، عبارت منبع برای هر سلول مورد نیاز است. هنگامی

که منبع از نوع<sup>۱</sup> 'به ازای واحد سطح'<sup>۳</sup> است، مساحت سطح سلول باید به شکل مناسب تعیین گردد.  $TCV$  به صورت کسر و  $TC$  به مخرج کسر اضافه شده است. همچنان که دیده خواهد شد، این کار باعث ساده‌تر شدن حل‌دستی می‌گردد و رابطه (۵-۳) به صورت رابطه (۶-۳) نوشته می‌شود.

<sup>1</sup> Coefficient

<sup>2</sup> Value

<sup>3</sup> Per unit area

$$\phi_p = \frac{\sum a_k \phi_k + S_\phi + \sum TCV}{a_p + \sum TC} \quad (6-3)$$

ذکر ویژگی‌های شرایط مرزی اعمالی بر روی میدان مدل‌سازی نیازمند دو نوع داده زیر است:

I- مرز در چه مکان و چه زمانی قرار دارد؟

II- مقادیر  $V$ ،  $C$  و  $T$  چند است؟

مکان و زمان به وسیله دستور PATCH و به صورت دستور زیر اعمال و منتقل می‌شود:

PATCH (Name, Type, IXF, IXL, IYF, IYL, IZF, IZL, ITF, ITL)

که در آن:

Name یک اسم منحصر برای PATCH است که برای ارجاع به آن نوشته می‌شود. T عبارت از Type یا نوع PATCH و شامل سلول، سطح و حجم است. IXF, IXL اولین و آخرین IX در PATCH است (به طور مشابه برای مختصات Y و Z و زمان T). هر کدام از محدودیت‌های PATCH را می‌توان در ترم‌های عدد REGION با استفاده از #IXF, #IXL و ... تعیین نمود. نوع دوم (پاسخ سؤال II) را با استفاده از دستور COVAL که به صورت زیر است، می‌نویسند:

COVAL (Name, Variable, Coefficient, Value)

که در آن:

Name عبارت است از اسم PATCH، که برای ارجاع دستور می‌باشد. Variable متغیری است که حل می‌شود. C ضریب است و V مقدار است (CHAM, 2008).

### ۳-۳-۵- اعمال و تنظیم شرایط مرزی

انواع شرایط مرزی قابل تعریف در نرم افزار PHOENICS به قرار زیر است:

- ✓ مقدار ثابت<sup>۱</sup>
- ✓ جریان ثابت / منبع ثابت<sup>۲</sup>
- ✓ شرط مرزی خطی<sup>۳</sup>
- ✓ شرط مرزی غیر خطی<sup>۴</sup>
- ✓ شرایط دیوار<sup>۵</sup>
- ✓ ورودی و خروجی<sup>۶</sup> (جریان‌ات ورودی و خروجی)
- ✓ منابع‌های تولید عمومی<sup>۷</sup>

#### ۳-۳-۵-۱- شرط مرزی مقدار ثابت

یک دمای ثابت در یک گوشه مکعب از مکان ۰ تا مکان ۱ در گوشه‌های مقابل به طور مورب

اعمال می‌گردد. مقدار PHI در هر یک از سلول‌ها با معادل قرار دادن C با یک عدد بزرگ و قرار دادن V

برابر مقدار مورد نیاز (مشخص) را می‌توان اعمال کرد. پس معادله به صورت زیر در می‌آید:

<sup>1</sup> Fixed Value

<sup>2</sup> Fixed Flux / Fixed source

<sup>3</sup> Linear Boundary Condition

<sup>4</sup> Non-linear Boundary Condition

<sup>5</sup> Wall Conditions

<sup>6</sup> Inflows and outflows

<sup>7</sup> General sources

$$\phi_p = \frac{\sum a_k \phi_k + S_\phi + \sum TCV}{a_p + \sum TC} \quad (7-3)$$

$$= \frac{\text{Small Number} + TCV}{\text{Small Number} + TC} \quad (8-3)$$

$$= \frac{TCV}{TC} = V \quad (9-3)$$

در PIL متغیر به صورت FIXVAL برای این هدف تهیه می‌شود. یک PATCH/COVAL معمولی به صورت زیر می‌باشد:

PATCH(FIXED, CELL, IXF, IXL, IYF, IYL, IZF, IZL, ITF, ITL)

COVAL(FIXED, PHI, FIXVAL, Required Value)

۱۰۰ مورد از مواد جامد مکعبی که یک گوشه آن در دمای پایین نگه داشته شده است و گوشه مقابل روبروی آن در دمای بالا نگه داشته شده است، در مدل‌های خود نرم افزار وجود دارد:

### GROUP13. Boundary Conditions and Special Sources

\*\*Corner at IX = IY = IZ = 1

PATCH(COLD, CELL, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1)

\*\*Fix Temperature to Zero

COVAL (COLD, TEMP, 1.E2, 0.0)

\*\*Corner at IX = NX, IY = NY, IZ = NZ

PATCH(HOT, CELL, NX, NX, NY, NY, NZ, NZ, 1, 1)

\*\*Fix temperature to 1.0

COVAL (HOT, TEMP, 1.E2, 1.0)

ضریب برابر ۱۰۰ در نظر گرفته شده است. با این کار یک هدایت محدود مابین مقدار خارجی<sup>۱</sup> و مقدار مرکزی<sup>۲</sup> در سلول اعمال می‌شود. FIXVAL مقدار مرکز سلول<sup>۳</sup> را با مقدار خارجی منطبق و ثابت می‌کند. می‌کند.

### ۳-۵-۲- شرط مرزی جریان ثابت / منبع ثابت

حرارت با یک نرخ پایا تولید می‌شود. یک منبع ثابت را می‌توان با استفاده از معادل قرار دادن C با یک مقدار کوچک وارد معادله کرد، بنابراین مخرج کسر تغییری نمی‌کند، و با قرار دادن V برابر با نسبت Source/C می‌توان آن را اعمال نمود. معادلات نهایی برای هر سلول به صورت زیر در می‌آید:

$$\phi_p = \frac{\sum a_k \phi_k + S_\phi + \sum TCV}{a_p + \sum TC} \quad (10-3)$$

$$= \frac{\sum a_k \phi_k + S_\phi (T * Tiny) \frac{Source}{Tiny}}{a_p + T * Tiny} \quad (11-3)$$

$$= \frac{\sum a_k \phi_k + S_\phi + Source}{a_p} \quad (12-3)$$

متغیر PIL به صورت FIXFLUX برای این هدف تهیه می‌شود. یک PATCH/COVAL معمولی به صورت زیر می‌باشد:

PATCH(SOURCE, area, IXF, IXL, IYF, IYL, IZF, IZL, ITF, ITL)

<sup>1</sup> External

<sup>2</sup> Central

<sup>3</sup> Cell-Centre

COVAL (SOURCE, phi, FIXFLU, Source\_ per\_ unit\_ area)

۳-۳-۵-۳- شرط مرزی خطی<sup>۱</sup>

یکی از مرزهای میدان اتلاف گرما به اطراف می‌باشد. ضریب انتقال گرمای خارجی  $H(W/m^2/K)$  و دمای خارجی  $T_{ext}(K)$ ، هم مشخص و شناخته شده‌اند و هم ثابت می‌باشند. منبع گرمایی برای سلول با مساحت مقطع  $A$  عبارت است از:

$$Q = A H (T_{ext} - T_p) \quad (۳-۱۳)$$

بدیهی است که در  $TC(V - \phi)$  اگر  $V = T_{ext}$ ،  $C = H$  و  $T = A$  باشد، یک PATCH/COVAL معمولی به صورت زیر خواهد بود:

PATCH (HEATLOSS, area, IXF, IXL, IYF, IYL, IZF, IZL, ITF, ITL)

COVAL(HEATLOSS, TEM1, Heat Transfer Coefficient, External Temperature)

۳-۳-۵-۴- شرط مرزی غیر خطی

در مثال قبلی، ضریب انتقال گرما و دمای خارجی به طور مشابه تابعی از بعضی متغیرها و یا دیگر عبارتهای مناسبی هستند که حل می‌شوند. یک منبع غیرخطی را می‌توان به صورت  $TC(V - \phi)$ ، با استفاده از سازگار کردن  $C$  و یا  $V$  در طول مسیر رفت و برگشت محاسبه و سپس به صورت خطی درآورد.

<sup>۱</sup> Linear Boundary Condition

تجدید نظر در C و V در EARTH با تنظیم C و V با یکی از علائم گراند<sup>۱</sup> مانند GRND1, GRND2 و GRND3 و ... اعمال می‌شود. بنابراین ممکن است که COVAL ها را به صورت زیر مشاهده کرد:

COVAL (HEATLOSS, TEM1, GRNDn, External Temperature)

Or

COVAL (HEATLOSS, TEM1, Heat Transfer Coefficient, GRNDn)

Or

COVAL (HEATLOSS, TEM1, GRNDn, GRNDn)

به طور معمول مثال‌های زیادی از قبل در GREX توسط CHAM کدنویسی شده است.

### ۳-۳-۵- شرط مرزی ورودی

تمام شرایط مرزی دبی جرمی به صورت خطی شده در معادلات پیوسته، با فشار  $P_1$  به عنوان متغیر مطرح می‌شوند. بنابراین یک منبع وزنی<sup>۲</sup> به صورت رابطه (۳-۱۴) است:

$$S_m = T C_m (V_m - P_1) \quad (۳-۱۴)$$

که در آن:

$V_m$  و  $C_m$  به ترتیب ضریب و مقدار برای  $P_1$  هستند. در یک مرز ورودی، دبی جرمی بدون اینکه به فشار داخلی وابستگی داشته باشد، ثابت است. این مفهوم با معادل قرار دادن  $C_m$  با FIXFLU و  $V_m$  با دبی جرمی مشخص به دست می‌آید. نشانه قراردادی برای ورودی جریان +ve و برای خروجی جریان -ve است. یک نرخ خروجی پایای جریان را می‌توان با استفاده از معادل قرار دادن با یک دبی جرمی منفی اعمال نمود. برای یک INLET دستور VALUE برای  $P_1$ ، شار جرمی را به مدل اعمال می‌کند. این

<sup>۱</sup> Ground Flags

<sup>۲</sup> Weight Source

به صورت (RHOIN\*VELIN) یا (دانسیته ورودی جریان \* سرعت ورودی جریان) تنظیم و به مدل فهمانده می‌شود. دستور VALUE برای  $W_1$  سرعت جریان ورودی را به مدل می‌فهماند. در این مورد تمام متغیرهای دیگر مقدار صفر را در ورودی جریان دریافت می‌کنند. اگرچه آنها وجود ندارند ولی دستور VALUE باید اضافه بشود.

### ۳-۳-۵-۶- شرط مرزی فشار ثابت

نوعی از یک مرز دبی جرمی است که بدون در نظر گرفتن دبی جرمی، فشار آن صفر می‌باشد. مثلاً در هر یک از متغیرهای دیگر، فشاری که ثابت است بوسیله وارد کردن یک عدد بزرگ برای  $C_m$  و فشار مورد نظر برای  $V_m$  به سیستم اعمال شده یا به مدل فهمانده می‌شود. برای استدلال‌های عددی، FIXVAL تمایل دارد که مقدار بزرگی دریافت کند. منبع 'True' نشان دهنده قسمت‌های اساسی یک معادله است که شامل هیچکدام از عبارت‌های پهنرفت و نفوذ نمی‌باشد. این‌ها در محیط EARTH به صورت کدنویسی شده هستند، از اینرو منبع‌های Built-In نامیده می‌شوند.

مثال‌هایی از این منبع‌های Built-In عبارتند از :

- منبع گرادیان فشار در معادلات اندازه حرکت.
- منبع‌های گریز از مرکز و با اثرات پیچشی در معادلات اندازه حرکت در مختصات قطبی - استوانه‌ای.
- مبدل‌های طبیعی معکوس فشار در معادله آنتالپی.
- اتلاف گرانش یا لزج حرارت در معادله آنتالپی.

منبع‌های Built-In را می‌توان با استفاده از متغیرهای تکین یا منفرد با استفاده از تنظیم N در اولین شناسه TERM‌ها، تعویض نمود. برای مثال می‌توان نوشت:

TERMS (W1, N, P, P, P, P, P)

به این ترتیب ترم‌های گرادیان فشار در معادله  $W_1$  غیر فعال خواهند شد.

۳-۳-۵-۷- منبع‌های USER – SET

همه منبع‌های دیگر به عنوان منبع‌های User-set در نظر گرفته می‌شوند. به طور معمول مثال‌های کاربردی زیادی از نوع دوم قبلاً بوسیله شرکت CHAM نوشته شده است. کد این منبع‌ها را می‌توان در مثال‌های قسمت GROUND و GREX و چندین مسیر دیگر که اسم آنها با GX شروع می‌شود، یافت.

۳-۳-۵-۸- پیاده‌سازی شرایط مرزی

شرایط مرزی را همیشه نمی‌توان به طور مشخص شده و تعیین شده بواسطه یک ضریب ثابت و یک مقدار ثابت به کار برد. در بسیاری از موارد، ضریب و مقدار، تابعی از یک یا چند متغیر حل شده<sup>۱</sup> می‌باشند، مقدار را نمی‌توان در هنگام ورود داده‌ها پیش‌بینی نمود. PHOENICS از پس مسائل پیچیده با الحاق و افزودن کدهای FORTRAN در مدول GROUND بر می‌آید. بنابر این قالب‌های ویژه‌ای (GRND, GRND1, ..., GRND10) را می‌توان به طور مشخص به عنوان ضریب و مقدار در دستور COVAL وارد نمود. این‌ها به EARTH جهت بررسی قسمت‌های مخصوص GROUND، فرستاده شده و یا معرفی می‌شوند، که ضریب‌ها و یا مقدارها را می‌توان محاسبه نموده و سپس به EARTH ارجاع دهد. تقریباً تمام شرایط در GREX برای این نوع‌ها، بررسی و مشخص شده است.

<sup>۱</sup> Solved

## ۳-۳-۵-۹- غیرخطی بودن

همه منابع‌های که کاربر تعریف می‌کند، در قالب خطی  $TC(V - \phi)$  به نرم افزار فهمانده می‌شود. دستورات PATCH و COVAL برای تعیین مکان، مدت زمان (برآورد زمانی یک عملیات)، C، T و V به کار برده می‌شوند. منابع‌های خطی را می‌توان به طور مستقیم از فایل Q1 و یا منو<sup>۱</sup> وارد کرد. بسیاری از کدهای مربوط به منابع‌های CFD را نمی‌توان در قالب خطی بیان کرد، زیرا آنها خطی نیستند و یا چندین متغیر وابسته به هم هستند که مقادیر تا زمانی که محاسبات کامل نشود، نامشخص می‌باشند.

۳-۳-۵-۱۰- منابع‌های غیرخطی<sup>۲</sup> در فایل Q1

منابع‌های خطی را می‌توان به صورت مستقیم در فایل Q1 وارد کرد، اما منابع‌های غیر خطی نیاز به افزودن کد در فایل Ground دارند. بسیاری از منابع‌های مطرح شده، قبل از این بوسیله CHAM تهیه و آماده شده‌اند. به علاوه کدهای GROUND قبل از اینکه در GREX استفاده شوند، در محدوده گسترده‌ای از منابع‌های غیر خطی می‌تواند به طور مستقیم به فایل Q1 افزوده شود، بدون اینکه به هیچ کدی از GROUND نیاز داشته باشد. این منابع‌ها با استفاده از تنظیم ضریب‌های غیر قراردادی تنظیم می‌شوند و یا به اسم PATCH های ویژه یا خاص به مدل معرفی می‌شوند.

معمولاً ضریب در منبع  $C(V - \phi)$  باید مثبت باشد، در غیر این صورت مسئله از لحاظ عددی به ناپایداری منتج می‌شود. نظر به اینکه ضریب‌های منفی در Q1 برای منابع‌های ویژه به کار می‌رود، در زیر تعدادی از منابع‌های غیرخطی به عنوان نمونه آورده شده است :

---

<sup>1</sup> Menu

<sup>2</sup> Non-Linear

- وضعیت فشار ایستایی یا راکد،
- منبع مرتبه دوم،
- منبع توانی،
- افت گرمای تابشی در یک محیط.

منبع‌ها با استفاده از گزینه 'User-Defined' نیز در VR تنظیم می‌شوند. شرایط مرزی و منبع‌ها در PHOENICS به صورت خطی در نظر گرفته می‌شوند و به قالب  $TC(V - \phi)$  که PHOENICS می‌فهمد، در می‌آیند. دو دستور مورد نیاز برای انتقال و اعمال اطلاعات عبارتند از دستور PATCH (که مربوط به تنظیمات مکان یا محل یا "where" و زمان یا "when" و T است) و دستور COVAL (که برای تنظیم مقادیرهای C و V می‌باشد). برای متغیر  $\phi$  انواع اصلی و عمده شرایط مرزی عبارتند از:

- شرط مرزی مقدار ثابت<sup>1</sup> (coefficient = FIXVAL).
- شرط مرزی جریان ثابت<sup>2</sup> (coefficient = FIXFLU).
- شرط مرزی نوع دیوار<sup>3</sup> (patch type = WALL).
- شرط مرزی خطی (Coefficient = Proportionality Constant).

منبع‌های غیرخطی را باید خطی کرد و برای قسمت‌های غیرثابت در GROUND برنامه نوشت. این بوسیله GRND1, GRND2, ..., GRND10, GRND برای ضریب و مقدار اعمال می‌گردد. بسیاری از این قبیل منبع‌ها قبلاً در GREX تهیه و آماده شده است (CHAM, 2008).

<sup>1</sup> Fix Value Boundary Condition

<sup>2</sup> Fix Flux Boundary Condition

<sup>3</sup> Wall Type Boundary Condition

## فصل چهارم

# کالیبراسیون مدل عددی حجم‌های محدود انتقال آلاینده‌های فلزی

## ۴-۱- مقدمه

در مبحث مربوط به آلودگی آب‌ها، درک و فهم تئوری حرکت آلاینده‌های موجود در آب بسیار مفید است. روش‌های تحلیلی برای حل مشکلات انتقال جرم، زمانی مناسب است که شرایط مرزی و اولیه ساده حاکم باشد. فرمول‌های تحلیلی تنها برای حالت‌هایی که سرعت جریان آب یکنواخت باشد مناسب هستند. به دلیل محدودیت‌های موجود از روش‌های عددی مناسب مانند روش حجمی‌های محدود می‌توان استفاده کرد (دولتی ارده‌جانی و دیگران، ۱۳۸۴). به کمک مدل‌ها می‌توان مکانیسم‌های انتقال جرم، نحوه اجرای روش‌های تصفیه و کم‌کردن اثرات آلودگی را طراحی، بهینه‌سازی و دقیقاً پیش‌بینی کرد (Edwards et al., 1995). اصولاً تعیین روند پخش و انتقال آلودگی در رودخانه‌ها این امکان را می‌دهد که با یک دید کارشناسی، نحوه توزیع آلودگی در آن را بررسی کرده و مناطقی را که خطر نفوذ آلودگی در آنها وجود دارد شناسایی کرده و اقدامات لازم را انجام داد (دولتی ارده‌جانی و دیگران، ۱۳۸۴).

روش‌های تحلیلی برای حل مسائل انتقال جرم بر یک سری فرضیه‌ها و شرایط مرزی ساده شده استوار است که سبب محدود شدن کاربرد آنها در حالت‌های پیچیده می‌شود (Doulati Ardejani, 2003). روش‌های عددی به طور وسیعی جهت مدل‌سازی جریان آب و حل مسائل انتقال جرم در محیط‌های متخلخل پیچیده استفاده شده‌اند (Rabhani and Warner, 1994). از آنجا که وضعیت‌های واقعی صحرایی از پیچیدگی‌های زیادی برخوردار هستند، برای مدل‌سازی مسائل زیست محیطی و هیدروژئولوژیکی مربوطه یکسری فرضیه‌ها برای ساده‌سازی حل مسئله ضروری به نظر می‌رسد. به منظور مطالعه و مدل‌سازی وضعیت‌های صحرایی پیچیده‌تر، بهتر است از روش‌های عددی که قادر به حل تقریبی معادلات حاکم برای جریان آب سطحی و انتقال آلاینده‌ها هستند استفاده شود (Wang and Anderson, 1982).

روش‌های عددی به خصوص روش حجم‌های محدود، متداول‌ترین روش‌های عددی مورد استفاده جهت پیش‌بینی بسیاری از مسائل زیست محیطی و ... می‌باشند (Pickens and Lennox, 1976);

(Pinder and Frind, 1972 ;Pinder, 1973 ;Grove, 1977). روش حجم‌های محدود یک تکنیک عددی بسیار قوی برای حل معادلات حاکم بر جریان سیال و انتقال جرم است (Green and Clothier, 1994 ;Putti et al., 1990 ;Binning and Celia, 1996 ;Svensson, 1997). به طور کلی روش حجم‌های محدود به عنوان یک روش دینامیک سیالات محاسباتی بدون تأیید و ارزیابی مراجع آزمایشی، تجربی و یا تحلیلی نمی‌تواند پیش‌بینی صحیحی برای متغیر تحت بررسی داشته باشد. برای حل مشکل، اعتبارسنجی مناسب روی فرآیند و روش مدل‌سازی انجام می‌شود (Patankar, 1980). مطالعات زیادی در زمینه مدل‌سازی الگوی پراکندگی آلاینده‌ها در درون آب انجام شده است و افراد زیادی با استفاده از روش CFD به مدل‌سازی فرآیندهای حاکم بر انتقال آلاینده‌ها در محیط آبی پرداخته‌اند (Lee and Park, 1994 ;Scanlon, 1998 ;Biak and Kim, 2002). کارهای زیادی در حوزه مدل‌سازی انتقال، توزیع و نحوه پخش آلاینده‌ها در محیط آبی توسط افرادی مانند ردی و اینیانگ، پیندر و فریند، پیندر، تانگ و پیندر، آلبرت و همکاران، آرون و همکاران، فریند و جرمین، داویسون و همکاران، گرای و پیندر انجام شده است (Frind and Albert et al., 1981 ;Aaron et al., 1982 ;Tang and Pinder, 1979 ;Gray and Pinder, 1976 ; Davison et al., 2005 ;Germain, 1986).

همچنین پپر و استفانسون در سال ۱۹۹۵ کارهایی در زمینه مدل‌سازی انتقال آلاینده‌ها و همچنین بسط مدل‌های ریاضی با استفاده از روش‌های عددی جهت پیش‌بینی نحوه انتقال و توزیع آلاینده‌ها در محیط آبی انجام داده‌اند (Pepper and Stephenson, 1995).

هیدرولوژیست‌ها با استفاده از معادله پهنرفت-پراکندگی (ADE) انتقال و رقیق‌سازی یک آلاینده را در آب‌های سطحی و زیرزمینی بررسی می‌کنند. روش‌های تفاوت محدود و اجزاء محدود زمانی که مؤلفه پراکندگی آلاینده در جریان آب غالب است مناسب هستند، اما زمانی که مؤلفه پهنرفت غالب است از روش حجم‌های محدود بیشتر استفاده می‌شود (Neihad, 2003).

در این فصل جهت کالیبراسیون مدل عددی حجم‌های محدود انتقال آلاینده‌های فلزی دو مسئله به صورت جداگانه مورد مدل‌سازی قرار گرفته است. مسئله اول مربوط به مدل‌سازی انتقال آلاینده‌های فلزی در رودخانه‌های متأثر از زهاب اسیدی معدن است. جهت مدل‌سازی، کدنویسی‌های لازم بر اساس معادله حاکم بر انتقال آلودگی در قالب نرم افزار MATLAB انجام شده است. رفتار مدل در حالت یک و دو بعدی با در نظر گرفتن نوع منبع تولید کننده آلاینده مورد بررسی قرار گرفته است. مسئله دوم مربوط به مدل‌سازی فرآیند جذب بیولوژیکی فلزات مس و منگنز از زهاب اسیدی معدن مس سرچشمه توسط بیومس قارچی اسپرژیلوس نایجر در یک رآکتور پیوسته است. در این مدل‌سازی چند حالت مختلف جذب یک آلاینده در درون رآکتور پیوسته مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج مدل‌سازی برای هر دو مسئله به شکل مطلوب بررسی گردیده و در ادامه آورده شده است.

#### ۲-۴- مدل‌سازی انتقال آلاینده‌های فلزی در رودخانه‌های متأثر از زهاب اسیدی معدن با استفاده از نرم افزار MATLAB

در این قسمت جهت کالیبراسیون مدل عددی حجم‌های محدود توزیع آلودگی ناشی از تخلیه زهاب اسیدی یک معدن به درون یک رودخانه فرضی (مدل)، مستقیم و کم عمق با عرض ۱ متر و طول ۳۰ متر در حالت یک‌بعدی، و عرض ۵ متر در حالت دوبعدی با همان طول بررسی می‌گردد. متوسط سرعت جریان در رودخانه ۱/۵ متر بر ثانیه و پراکندگی متوسط (D) در دو جهت طولی و عرضی رودخانه یکسان فرض شده و حداقل مقدار آن در محیط رودخانه ۲/۲۵ متر مربع برثانیه از حاصلضرب ضریب پراکندگی (۱/۵ متر) در سرعت متوسط جریان آب به دست آمده است. مقدار ضریب نفوذ برابر  $1 \times 10^9$  متر مربع بر ثانیه است. با توجه به کوچک بودن ضریب نفوذ، از این مؤلفه در انتقال آلودگی صرف‌نظر می‌گردد (دولتی ارده‌جانی و دیگران، ۱۳۸۴). در حالت یک‌بعدی، آلاینده در نقطه‌ای در وسط رودخانه تخلیه شده و با استفاده از معادلات ریاضی حاکم، صحت مدل‌سازی بررسی گردیده است. در

حالت دوبعدی نیز مدل‌سازی توزیع آلودگی در رودخانه فرضی انجام شده و نتایج مدل‌سازی دوبعدی به صورت کنترولی در زمان‌های معین رسم شده است. مدل‌سازی یک و دوبعدی در دو حالت زیر انجام شده و نتایج ارائه شده است:

- در حالت اول، توزیع آلودگی پیوسته است؛ در این حالت نقاط واقع در محدوده آلودگی دارای مقدار غلظت ثابتی در زمان‌های مختلف هستند.

- در حالت دوم، توزیع آلودگی آنی یا گسسته است؛ در این حالت با نقاط محدوده آلودگی همانند نقاط عادی میدان رفتار می‌شود، با این تفاوت که یک غلظت (C) بزرگتر از صفر در زمان  $t_0$  دارد.

از نظر ریاضی براساس اینکه کدام یک از دو حالت بالا رخ دهد می‌توان تصمیم گرفت که با محدوده آلودگی چگونه رفتار کرد. در حالت اول، زمانی که منبع تولید آلودگی پیوسته می‌باشد، آلاینده با غلظت ثابت  $C_0$  در زمان‌های مختلف تولید می‌شود. در حالت دوم (توزیع یکباره) بعد از مدت زمان مشخصی منبع آلودگی حذف می‌گردد.

#### ۴-۲-۱- معادله حاکم بر انتقال آلاینده و گسسته‌سازی آن در حالت یک‌بعدی

با فرض عدم اندرکنش (عدم وجود جذب، تبادل کاتیونی و عوامل دیگر) آلاینده با بستر رودخانه، معادله حاکم بر توزیع آلودگی در رودخانه در حالت یک بعدی به صورت رابطه (۴-۱) است (Pinder and Frind, 1972; Pinder, 1973):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (۴-۱)$$

که در آن:

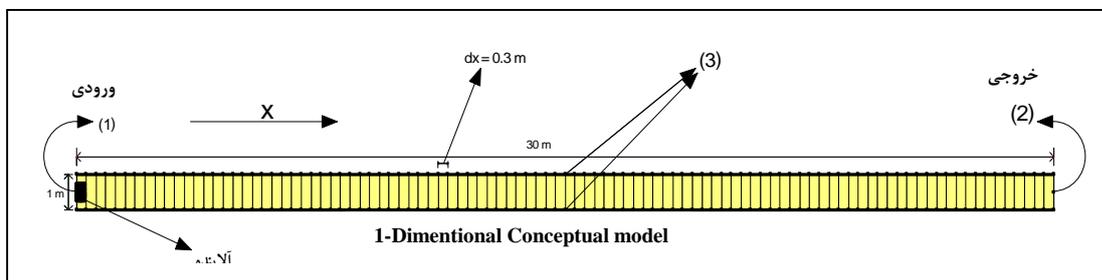
$C$  = غلظت آلاینده،

$t =$  زمان،

$D_x =$  ضریب پراکندگی در جهت  $x$

$u_x =$  سرعت جریان آب در جهت  $x$  است.

مدل یک‌بعدی در نظر گرفته شده در جهت  $x$  دارای ۱۰۰ مش و در جهت  $y$  تنها یک ردیف مش دارد و  $dx$  که ابعاد المان را در جهت  $x$  نشان می‌دهد برابر  $0.3$  متر است (شکل ۱-۴).



شکل (۱-۴): مدل مفهومی مربوط به محدوده پخش آلودگی و مش‌بندی مناسب برای رودخانه در حالت یک‌بعدی

معادله حاکم بر انتقال آلودگی بر روی یک شبکه مستطیلی منفصل می‌گردد. در فرآیند منفصل‌سازی، عمق جریان آب واحد در نظر گرفته شده و همچنین سرعت در جهت محور قائم ناچیز فرض شده است. از این معادله نسبت به زمان و حجم انتگرال گرفته می‌شود. برای انتگرال‌گیری روی حجم از قضیه دیورژانس استفاده شده، آن را به انتگرال روی سطح تبدیل کرده و پس از ساده‌سازی انتگرال سطح و گرفتن انتگرال زمان و ساده‌سازی ریاضی، رابطه (۲-۴) به دست می‌آید (Versteeg and Malalasekera, 1995):

$$\frac{[C_{t+\Delta t} - C_t] \Delta v}{\Delta t} + [uAC]_e - [uAC]_w = [D_x A \frac{\partial C}{\partial x}]_e - [D_x A \frac{\partial C}{\partial x}]_w \quad (2-4)$$

که در آن:

$C =$  متغیر معادله جزئی و نشان‌دهنده غلظت آلاینده است،

$C_P$  و  $C_E =$  به ترتیب غلظت در گره‌های شرقی و غربی و

$\delta x_{PW}$  و  $\delta x_{EP}$  = به ترتیب فاصله گره‌های  $E-P$  و  $P-W$  است.

با فرض خطی بودن  $C$ ، رابطه (۳-۴) به دست می‌آید (Versteeg and Malalasekera, 1995):

$$\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_e = \frac{C_E - C_P}{\delta x_{EP}} \quad ; \quad \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_w = \frac{C_P - C_W}{\delta x_{PW}} \quad (3-4)$$

جمله پراکندگی معادله (۲-۴) برای نقاط  $w$  (نقطه ۱ در شکل ۱) و  $e$  (نقطه ۲ در شکل ۱) بر اساس عدد پکلت ۴ تخمین زده می‌شود (روش پیوندی). اگر  $F$  شار جرمی جابجا شده باشد، با استفاده از تغییر متغیر معادله (۲-۴) به صورت رابطه‌های (۴-۴) و (۵-۴) بازنویسی می‌گردد.

الف) برای روش اختلاف مرکزی<sup>۱</sup>، اگر  $-2 < Pe < 2$ ، رابطه (۴-۴) برقرار است:

$$[C_p^{n+1} - C_p^n]k = \text{dix}[C_E - C_P] - \text{dix}[C_P - C_W] + \frac{F}{2}[C_E + C_P] + \frac{F}{2}[C_P + C_W] \quad (4-4)$$

ب) برای روش بالادست<sup>۲</sup>، اگر  $Pe < -2$  و  $2 < Pe$ ، رابطه (۵-۴) برقرار است:

$$[C_p^{n+1} - C_p^n]k = \text{dix}[C_E - C_P] - \text{dix}[C_P - C_W] - F[C_P] + F[C_W] \quad (5-4)$$

برای تعیین موقعیت زمانی مقادیر طرف راست روابط (۴-۴) و (۵-۴)، از روش تفاوت زمانی استفاده می‌گردد، با استفاده از یک پارامتر وزنی ( $\theta$ ) که مقدارش بین ۰ و ۱ است، می‌توان روش را برای کل مدل تعمیم داد، به طوری که:

- اگر  $\theta = 0$  باشد تمامی  $C$  ها متعلق به زمان  $n$  هستند (یعنی روش صریح)؛

- اگر  $\theta = 1$  باشد تمامی  $C$  ها متعلق به زمان  $n+1$  هستند (یعنی روش ضمنی)؛

- اگر  $\theta = 1/2$  باشد از هر دو زمان  $n$  و  $n+1$  استفاده شده است (یعنی طرح کرانک-نیکلسون).

<sup>1</sup> Central Difference Method

<sup>2</sup> Upwind Method

معادلات نقاط مختلف میدان با توجه به  $\theta$  های مختلف برای حالت اختلاف مرکزی (پکلت بین ۲- و ۲) برای نقاط مشخص شده در شکل (۱-۴) به صورت رابطه (۶-۴) است:

$$(1) \Rightarrow \begin{cases} \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_w = 0 \\ C_w = C_p \end{cases}, \quad (2) \Rightarrow \begin{cases} \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_e = 0 \\ C_p = C_E \end{cases} \quad (6-4)$$

شرط مرزی (۳) در شکل (۱-۴) موقعیت مرز غیر جریانی را نشان می‌دهد. در روش صریح ( $\theta=0$ ) ضرایب معادله که با تقریب اختلاف مرکزی نوشته شده به صورت رابطه (۷-۴) است:

$$a_E = \frac{D_x A_e}{\delta x_{EP}} - \frac{F_e A_e}{2}; \quad a_W = \frac{D_x A_w}{\delta x_{WP}} + \frac{F_w A_w}{2} \quad (7-4)$$

### ۴-۳- مدل سازی یک بعدی در حالت لحظه‌ای و پیوسته و اعتبارسنجی مدل

#### ۴-۳-۱- مدل سازی در حالت پیوسته بودن منبع آلودگی

در حالتی که منبع آلودگی پیوسته و در ورودی سیستم غلظتی برابر با  $C_0 = 1$  تولید نماید و غلظت اولیه آن در سیستم حرکت صفر باشد، شرایط مرزی و اولیه را می‌توان به صورت رابطه (۸-۴) در نظر گرفت (Pinder and Frind, 1972):

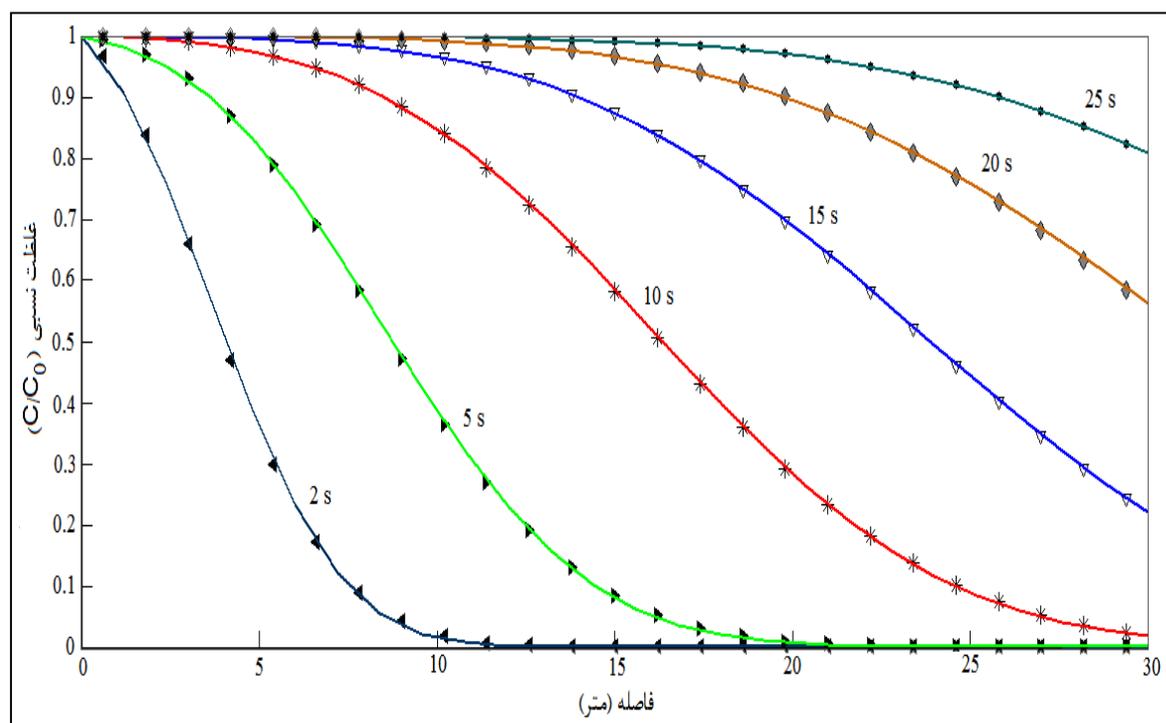
$$C(x, 0) = 0; \quad C(0, t) = C_0 = 1; \quad C(\infty, t) = 0 \quad (8-4)$$

حل تحلیلی معادله انتقال شامل فرآیندهای پهنرفت-پراکندگی تحت شرایط بالا به صورت رابطه (۹-۴) است (Reddi and Inyang, 2000):

$$C = \frac{C_0}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left( \frac{x - v_x t}{\sqrt{4 D_x t}} \right) + \exp \left( \frac{v_x x}{D_x} \right) \operatorname{erfc} \left( \frac{x + v_x t}{\sqrt{4 D_x t}} \right) \right\} \quad (9-4)$$

مقایسه نتایج مربوط به حل تحلیلی و مدل‌سازی عددی معادله انتقال شامل فرآیندهای پهنرفت-

پراکندگی و مقایسه در حالتی که منبع آلودگی پیوسته است در شکل (۲-۴) نشان داده شده است:



شکل (۲-۴): مقایسه نتایج مدل‌سازی تحلیلی (خطوط) و عددی (نقاط) انتقال پیوسته آلودگی به ترتیب در زمان‌های ۲، ۵، ۱۰، ۱۵، ۲۰ و ۲۵ ثانیه

با توجه به شکل (۲-۴) می‌توان فهمید که برازش خوبی بین نتایج مدل‌سازی تحلیلی و مدل‌سازی عددی وجود دارد و مقدار خطا زیر ۱ درصد می‌باشد. همچنین با گذشت زمان و انتقال آلودگی به سمت پایین دست مدل، محیط کاملاً آلوده شده و غلظت نسبی پس از گذشت زمان ۲۵ ثانیه در محیط به سمت ۱ میل می‌کند.

#### ۲-۳-۴- مدل‌سازی در حالت آنی یا گسسته بودن منبع آلودگی

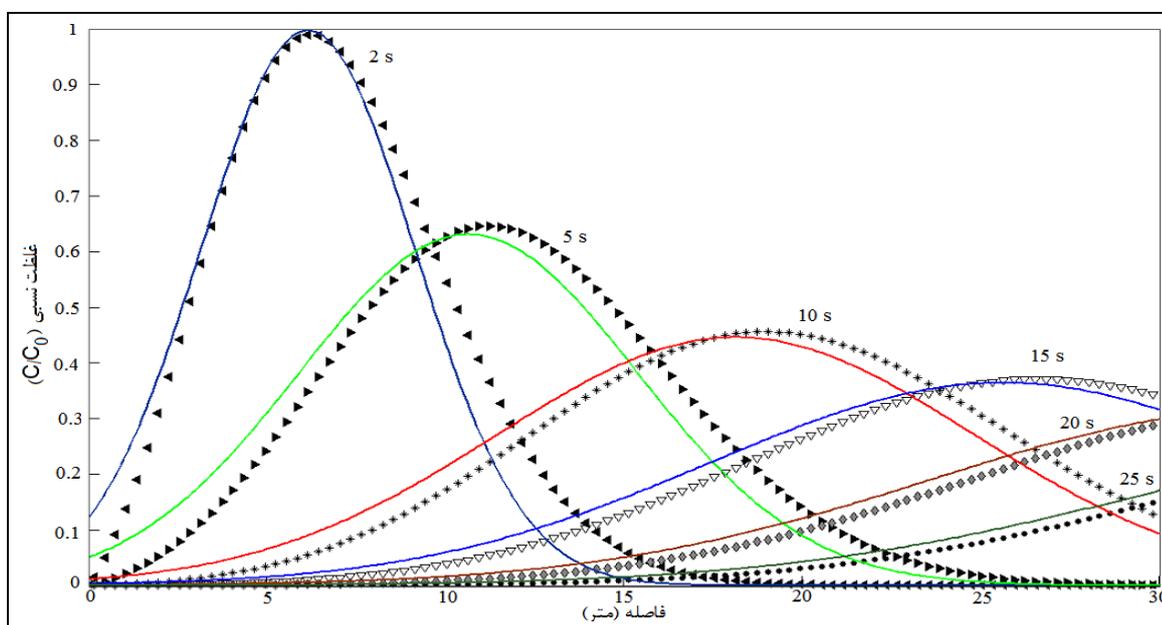
این حالت مدل‌سازی بیانگر تزریق یک پالس از آلاینده در فاصله  $x=0$  با غلظت زمینه صفر در

بقیه میدان می‌باشد. اگر  $M$  جرم تزریقی بر سطح مقطع واحد باشد، با فرض شرایط (۴-۱۰)، معادله ریاضی (۴-۱۱) صادق است (Reddi and Inyang, 2000):

$$C(x, 0)=0 \quad ; \quad C(0, t)=C_0=1 \quad (4-10)$$

$$C(x, t) = \frac{M}{\sqrt{4\pi D_x t}} \exp\left(-\frac{(x - v_x t)^2}{4 D_x t}\right) \quad (4-11)$$

از حل معادله (۴-۱۱) نمودارهای شکل (۴-۳) به دست می‌آید.



شکل (۴-۳): مقایسه نتایج مدل‌سازی تحلیلی (خطوط) و عددی (نقاط) انتقال پیوسته آلودگی به ترتیب در زمان‌های ۲، ۵، ۱۰، ۱۵، ۲۰ و ۲۵ ثانیه

از شکل (۴-۳) می‌توان فهمید که غلظت‌ها در یک محل مشخص  $x$  به تدریج افزایش و سپس کاهش نشان می‌دهد زیرا منبع تولید آلودگی محدود بوده و از آنجایی که آلاینده غیر واکنشی است، مساحت ناحیه زیر منحنی‌ها مساوی است (دولتی ارده‌جانی و دیگران، ۱۳۸۴).

با توجه به شکل (۴-۲) می‌توان فهمید که برازش خوبی بین مدل تحلیلی و عددی وجود دارد و مقدار خطا زیر ۱ درصد می‌باشد، همچنین با گذشت زمان و انتقال آلودگی به سمت پایین دست مدل، محیط کاملاً آلوده شده و غلظت نسبی پس از گذشت زمان ۲۵ ثانیه در محیط به سمت ۱ میل می‌کند.

مدت زمانی که آلاینده وارد محیط جریان می‌شود برابر ۲ ثانیه در نظر گرفته شده است. همانطور که از شکل (۳-۴) دیده می‌شود برازش خوبی بین مدل‌سازی عددی و تحلیلی وجود دارد و مقدار خطا زیر ۲ درصد می‌باشد. انحراف منحنی‌های مربوط به مدل‌سازی عددی نسبت به مدل‌سازی تحلیلی در نتیجه کاهش زیاد چگالی غلظت و عدم پیوسته بودن تابع غلظت در مدل‌سازی عددی می‌باشد و با توجه به مقدار پایین غلظت آلاینده در پایین دست مدل، این خطا قابل چشم‌پوشی می‌باشد.

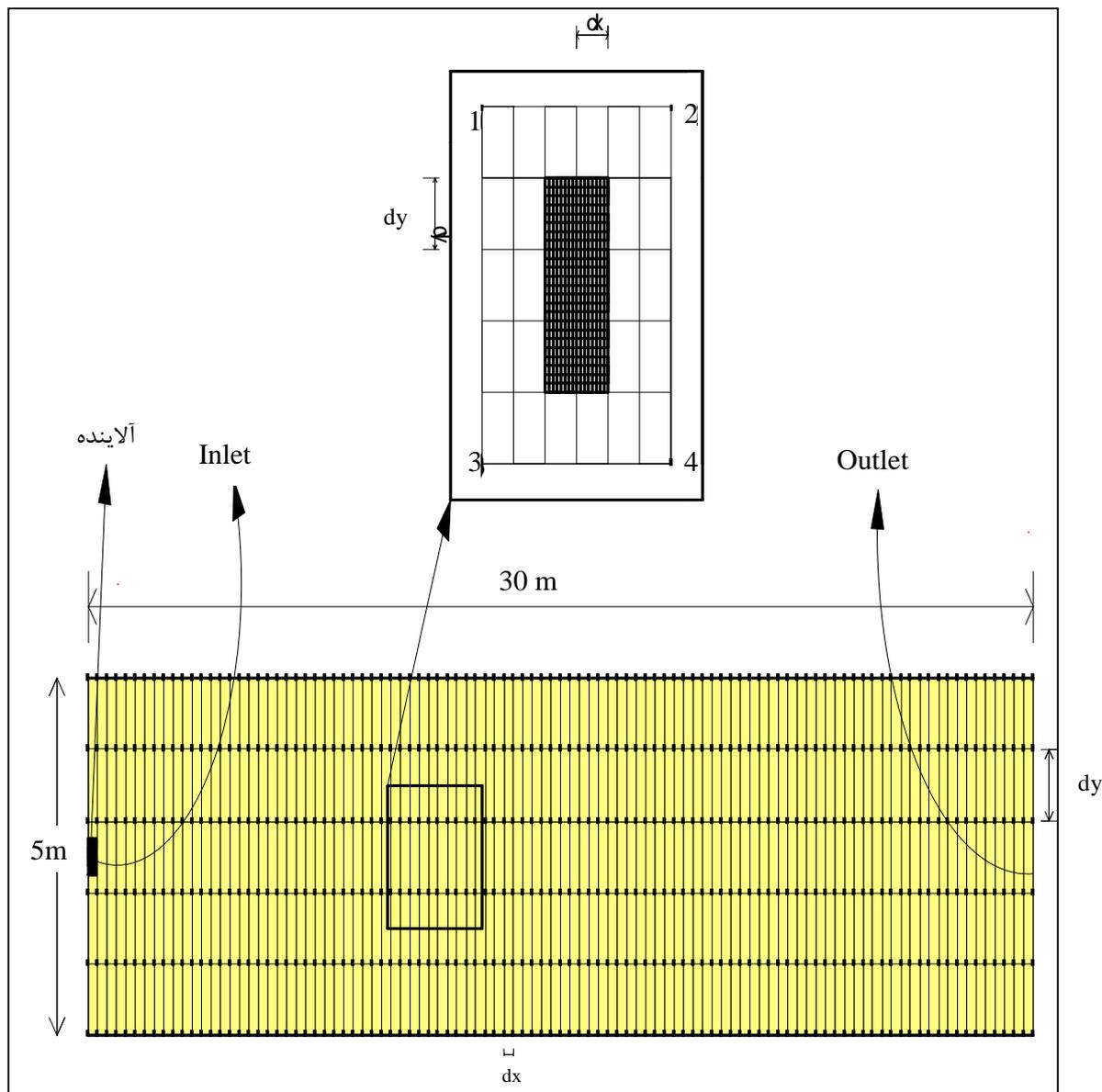
#### ۴-۴- مدل‌سازی دوبعدی

در فرآیند مدل‌سازی دوبعدی درست مثل مدل‌سازی یک بعدی عمل می‌شود. در حالت دوبعدی طول مدل را ۳۰ متر و عرض مدل را ۵ متر در نظر گرفته و ضریب پراکندگی در جهت  $y$  با ضریب پراکندگی در جهت  $x$  برابر در نظر گرفته می‌شود. در حالت دو بعدی معادله دیفرانسیل جزئی حاکم به صورت رابطه (۴-۱۲) است (Marino, 1974):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - u_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (۴-۱۲)$$

در حالت دو بعدی با صفر در نظر گرفتن سرعت در جهت  $y$ ، تنها مؤلفه پخش یا نفوذ در این جهت وجود دارد. مانند حالت یک بعدی، معادله به صورت شبکه‌ای مستطیلی منفصل می‌گردد (شکل ۴-۴). معادلات نقاط مختلف میدان با توجه به  $\theta$  های مختلف برای حالت اختلاف مرکزی (پکلت بین ۲- و ۲) برای نقاط مشخص شده در شکل (۴-۴) به صورت رابطه (۴-۱۳) است:

$$\left\{ \begin{array}{l} a_E = \frac{D_x A_e}{\delta x_{EP}} - \frac{F_e A_e}{2} \\ a_W = \frac{D_x A_w}{\delta x_{WP}} + \frac{F_w A_w}{2} \end{array} \right\}, \quad \left\{ \begin{array}{l} a_N = \frac{D_y A_n}{\delta y_{NP}} \\ a_S = \frac{D_y A_s}{\delta y_{SP}} \end{array} \right. \quad (۴-۱۳)$$



شکل (۴-۴): مدل مفهومی دوبعدی و شرایط مرزی مربوط به محدوده آلودگی و مش‌بندی مناسب

#### ۴-۴-۱- مدل‌سازی در حالت پیوسته بودن منبع آلودگی

نتایج مربوط به حل عددی معادله انتقال شامل فرآیندهای پهنرفت-پراکندگی با منبع آلودگی پیوسته در شکل (۴-۵) به صورت دوبعدی در زمان‌های ۲، ۵، ۱۰، ۱۵، ۲۰ و ۲۵ ثانیه نشان داده شده

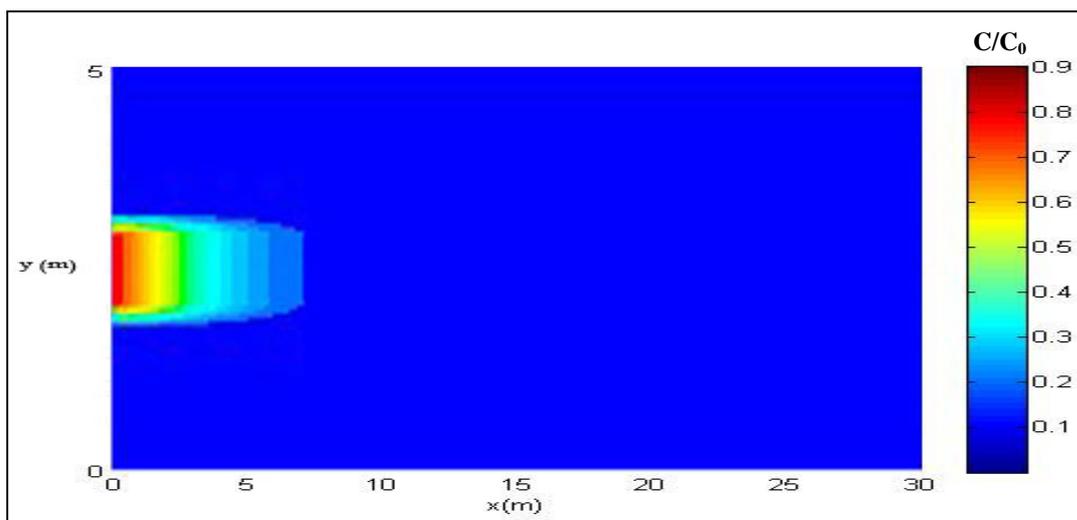
است. در این حالت، منبع آلودگی در ورودی سیستم غلظتی برابر با  $C_0 = 1$  تولید می‌نماید و غلظت اولیه آن در سیستم حرکت صفر می‌باشد.

از شکل (۴-۵) اینگونه استنباط می‌شود که آلاینده به صورت پیوسته، بیشتر در جهت جریان و در اثر مؤلفه پهنرفت انتقال می‌یابد. در واقع مؤلفه نفوذ ناچیز است و جدا از عامل پهنرفت، مؤلفه پراکندگی مکانیکی به عنوان بخشی از مؤلفه پراکندگی هیدرودینامیکی در این مدل‌سازی و نحوه پخش و گسترش آلاینده دخیل است. پراکندگی مکانیکی از حاصلضرب سرعت جریان در ضریب پراکندگی به دست می‌آید.

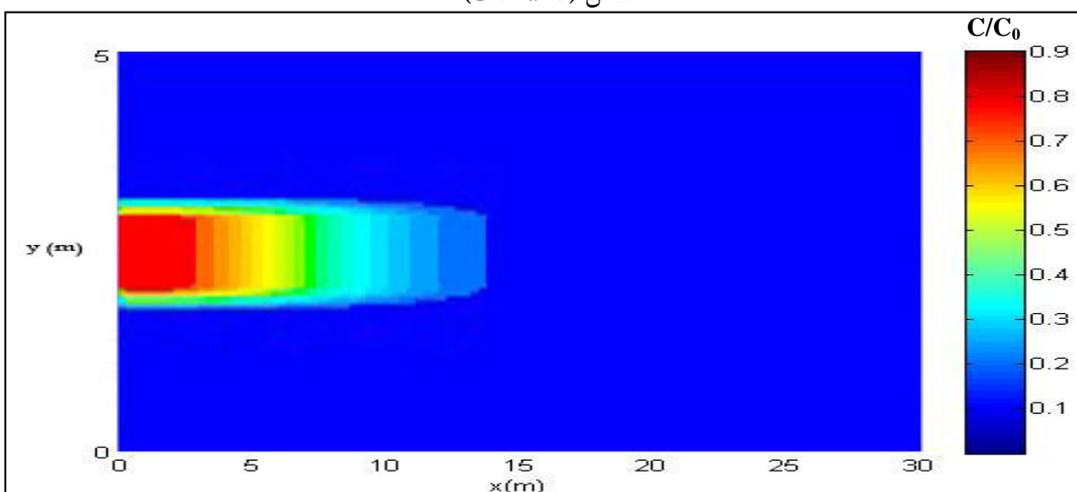
#### ۴-۴-۲- مدل‌سازی در حالت گسسته یا آنی بودن منبع آلودگی

در حالتی که منبع آلودگی آنی و در ورودی سیستم غلظتی برابر با  $C_0 = 1$  تولید نماید و غلظت اولیه آن در سیستم جریان صفر بوده، نتایج مربوط به حل عددی معادله انتقال شامل فرآیندهای پهنرفت- پراکندگی در شکل (۴-۶) به صورت دوبعدی در زمان‌های ۲، ۵، ۱۰، ۱۵، ۲۰ و ۲۵ ثانیه نشان داده شده است.

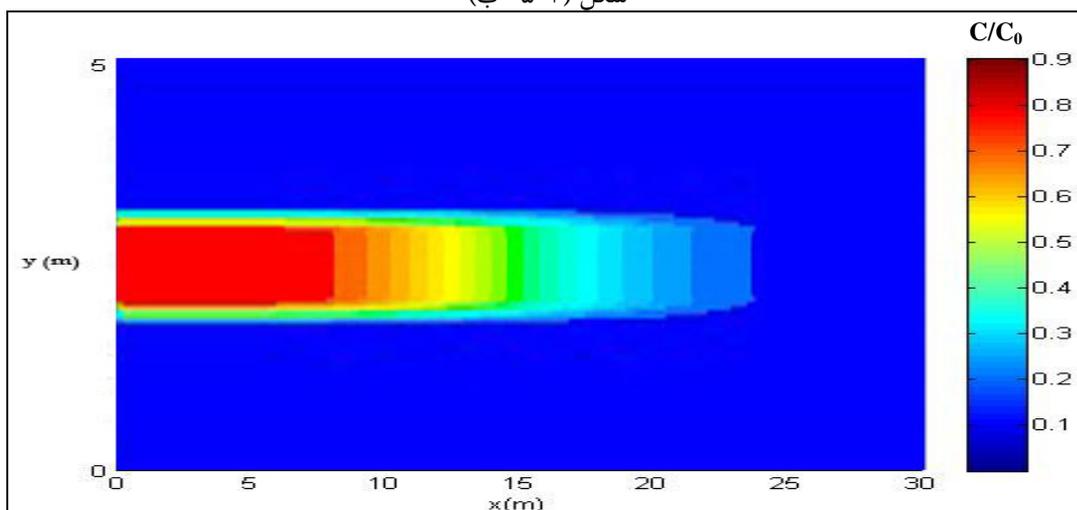
در این حالت جرم تزریق شده بر واحد سطح مقطع معادل واحد در نظر گرفته شده است و تنها تفاوت آن با حالت پیوسته این است که منبع آلودگی بعد از مدت زمان ۲ ثانیه حذف می‌گردد و به صورت یک پالس از آلودگی در محیط پیشروی کرده و محیط را آلوده می‌کند.



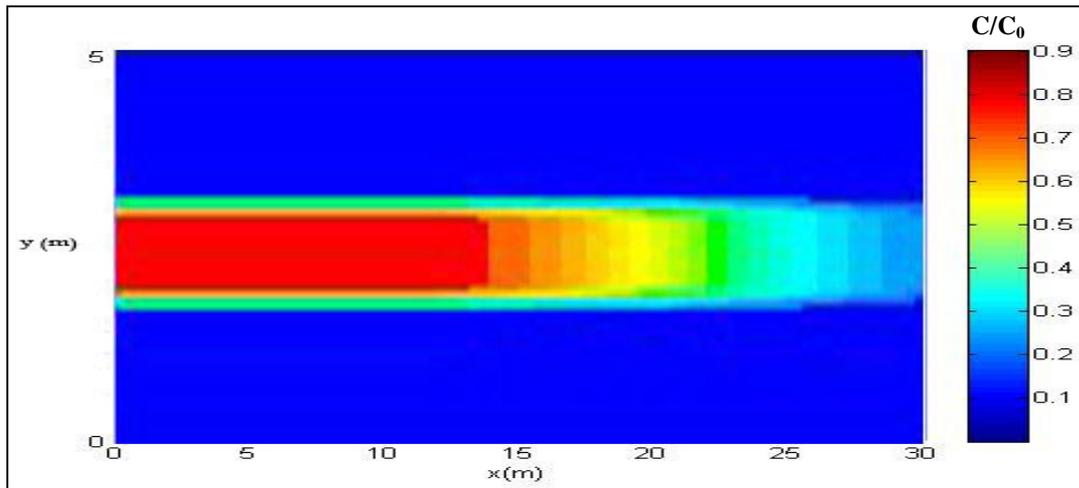
شکل (۴-۵-الف)



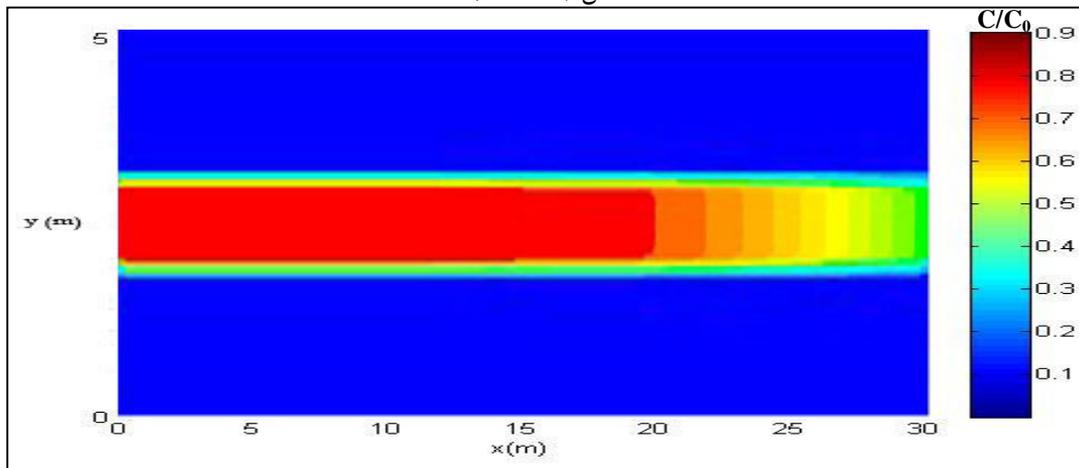
شکل (۴-۵-ب)



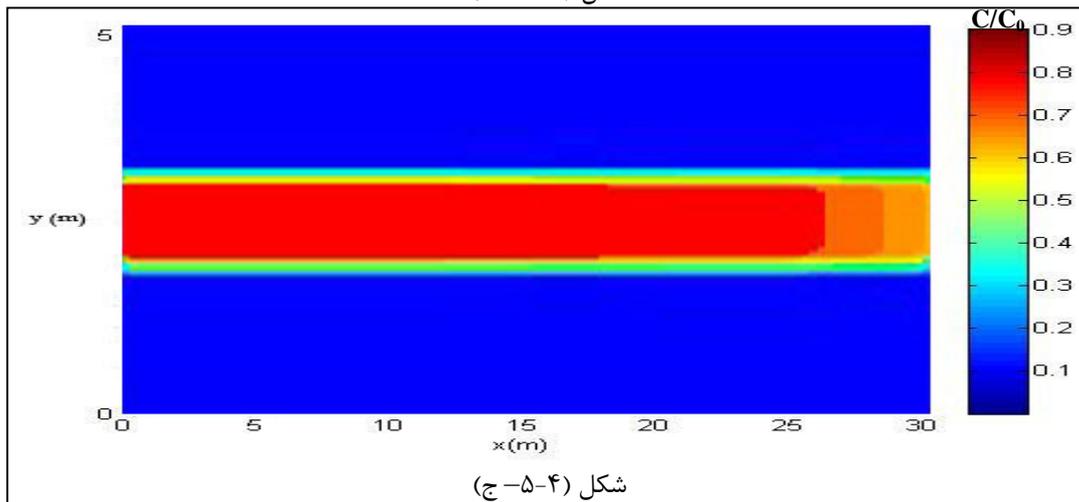
شکل (۴-۵-پ)



شکل (۴-۵-ت)

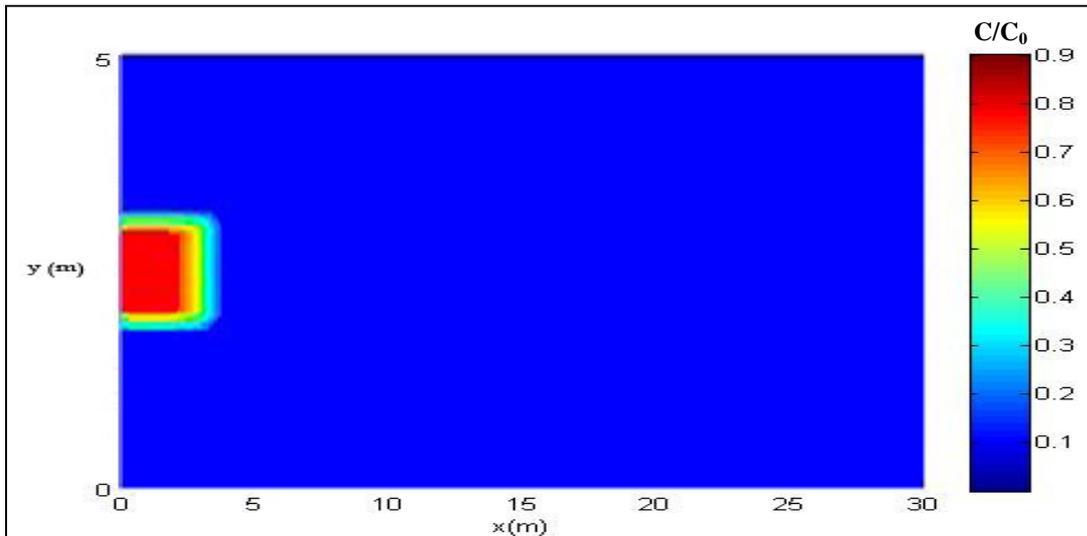


شکل (۴-۵-ث)

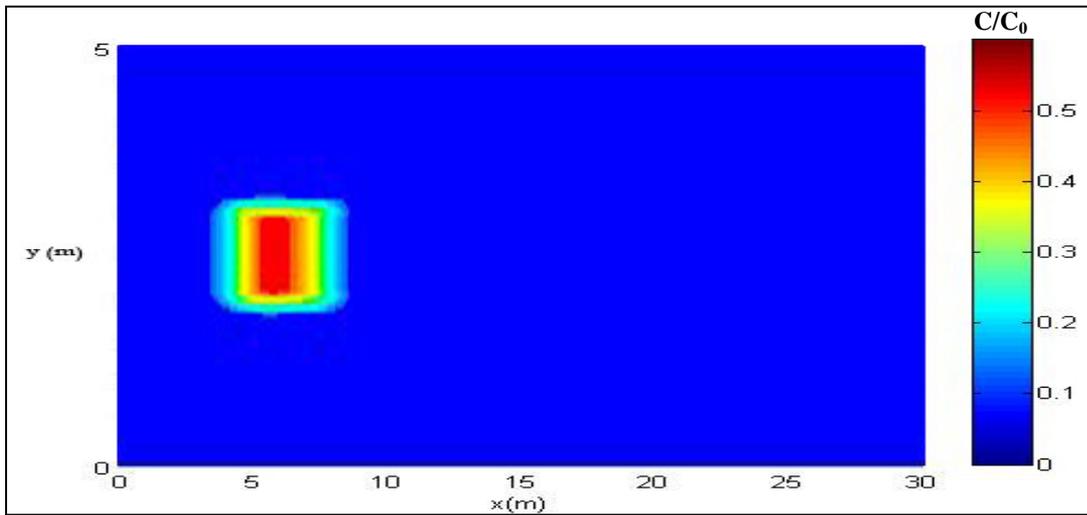


شکل (۴-۵-ج)

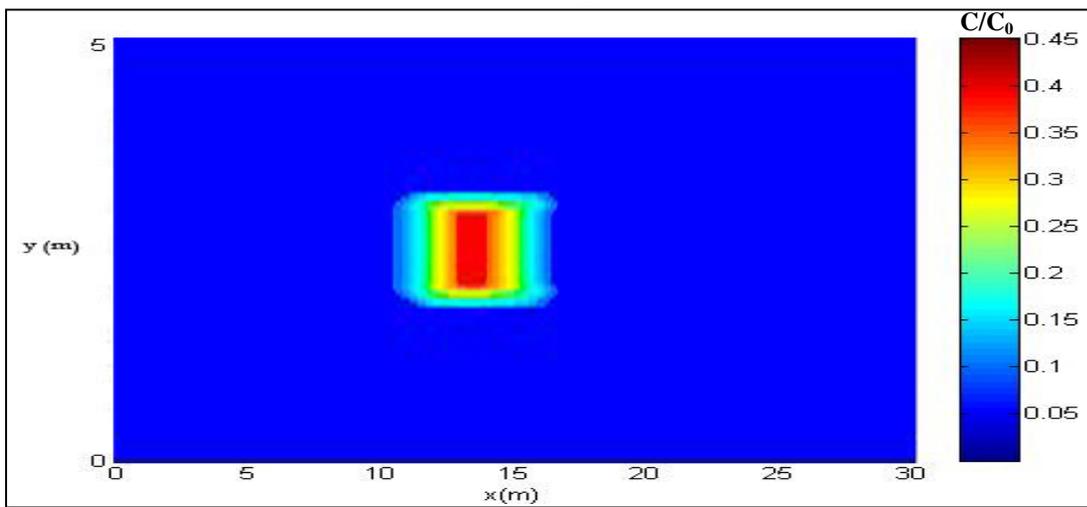
شکل (۴-۵): نتایج مربوط به مدل‌سازی عددی دوبعدی معادله انتقال آلودگی در زمان‌های ۲، ۵، ۱۰، ۱۵، ۲۰ و ۲۵ ثانیه شامل فرآیندهای پهنرفت-پراکندگی در حالت پیوسته بودن منبع آلودگی



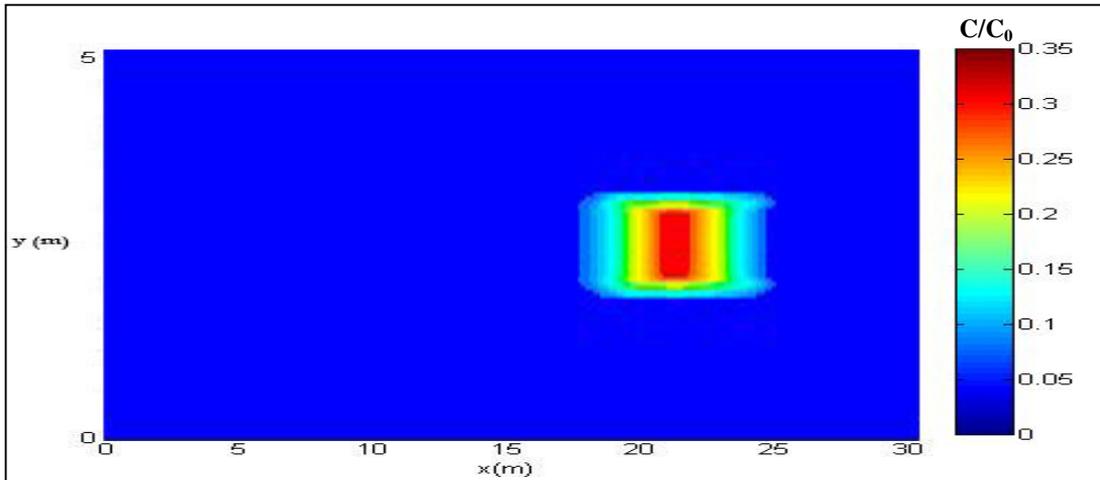
شکل (۴-۶-الف)



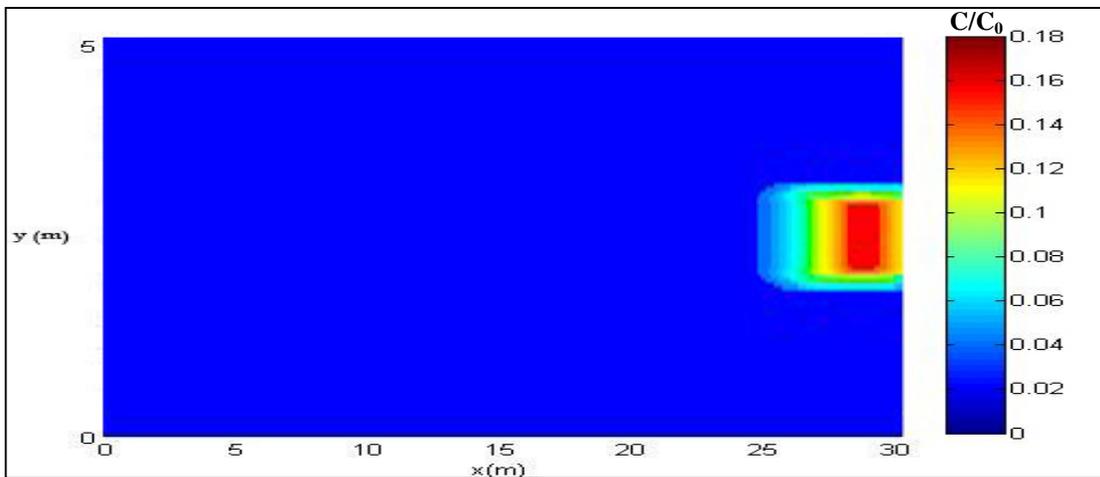
شکل (۴-۶-ب)



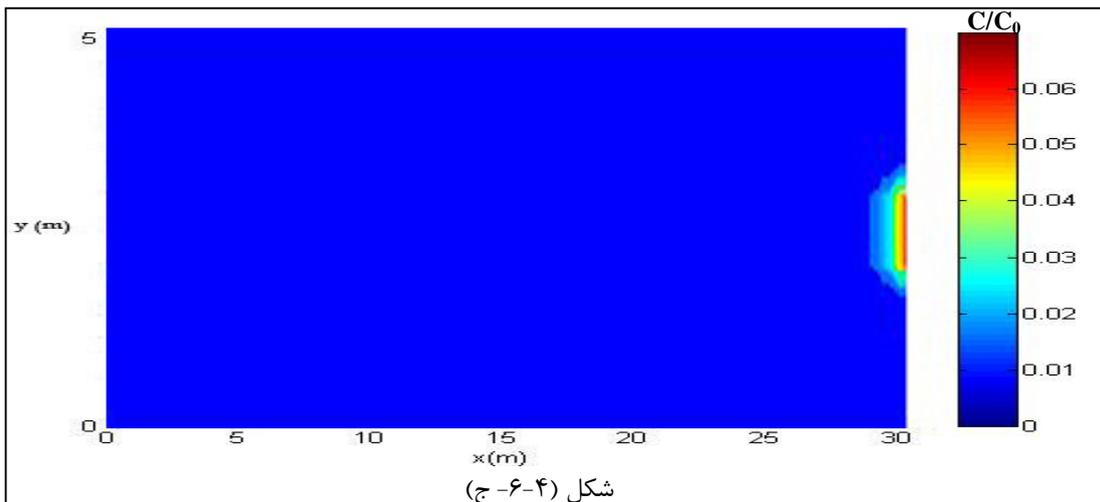
شکل (۴-۶-پ)



شکل (۴-۶-ا) ت



شکل (۴-۶-ب) ث



شکل (۴-۶-ج) ح

شکل (۴-۶): نتایج مربوط به مدل سازی عددی دوبعدی معادله انتقال در زمان‌های ۲، ۵، ۱۰، ۱۵، ۲۰ و ۲۵ ثانیه شامل فرآیندهای پهنرفت- پراکندگی در حالت گسسته بودن منبع آلودگی

#### ۴-۵- مدل‌سازی فرآیند جذب بیولوژیکی فلزات مس و منگنز در زهاب اسیدی معدن مس سرچشمه در یک رآکتور پیوسته

فلزات سنگین در طبیعت در اثر فعالیت‌های صنعتی و توسعه تکنولوژی بیش از میزان طبیعی در محیط زیست منتشر شده‌اند (Vegilo et al., 2003). این فلزات به دلیل سمی بودن اثرات نابهنجاری روی محیط زیست و سلامت موجودات زنده بخصوص انسان‌ها دارند (Gin et al., 2002). حضور بیش از حد این فلزات و تجمع آنها در بافت‌های موجودات زنده باعث ایجاد سرطان و در نهایت مرگ می‌شود (Guangyu and Viraraghaven, 2001 ; Volesky, 1990). این فلزات از طریق فعالیت‌های صناعی مثل آبکاری، ذوب و تصفیه فلزات، فعالیت‌های معدنی، نیروگاه‌ها، صنایع نساجی، باتری سازی، سرامیک، شیشه و ... وارد محیط زیست می‌شوند (Raghavana et al., 2004). اکثر فلزات سنگین نمک-های محلول در آب را تشکیل می‌دهند و در نتیجه با روش‌های فیزیکی معمولی قابل جداسازی نیستند. روش‌های سنتی تصفیه فاضلاب اغلب نیاز به دستگاه‌ها و مواد گران قیمت داشته و تولید لجن سمی می‌کنند. بازدهی این روش‌ها نسبت به روش‌های بیولوژیکی پایین است. حذف انتخابی فلزات در غلظت‌های پایین، زمان جذب و حذف کوتاه‌تر، سادگی در عملکرد، استفاده مقدار کم جاذب در جذب غلظت‌های بالای فلز، امکان استفاده مجدد بایومس برای عملیات جذب، دلایل استفاده گسترده از روش بیولوژیکی در تصفیه فاضلاب‌ها و زهاب‌ها است (Volesky, 1990).

مس یکی از فلزات پرکاربرد در صنعت است که در لیست آلاینده‌های موجود در زهاب‌ها آمده که در سال ۱۹۸۷ توسط آژانس حفاظت از محیط زیست ایالات متحده آمریکا (USEPA) منتشر شده است. مطالعات زیادی بر روی جذب بیولوژیکی مس صورت گرفته که عمده آنها روی جذب مس از زهاب مصنوعی انجام شده است (Ramovski and Sciban, 2007).

منگنز یکی دیگر از فلزات موجود در زهاب اسیدی معدن است که طبق استانداردهای موجود، غلظت

آن در زهاب خروجی نباید از ۱ ppm بیشتر باشد. مقادیر بیش از استاندارد، موجب به خطر افتادن سلامت موجودات زنده می‌گردد. در مورد جذب بیولوژیکی منگنز تحقیقات محدودی موجود می‌باشد و مدل‌سازی فرآیند جذب می‌تواند در ارائه روش‌های مناسب تصفیه زهاب‌های آلوده به این فلزات بسیار مفید باشد (دولتی ارده‌جانی و دیگران، ۱۳۸۸).

در این بخش از روش حجم‌های محدود که یکی از روش‌های گسسته‌سازی برای معادلات حاکم بر بسیاری از مسائل زیست محیطی است، جهت مدل‌سازی فرآیند جذب بیولوژیکی توسط قارچ اسپرژیلوس نایجر استفاده شده است. برای این منظور از نرم افزار چند منظوره PHOENICS استفاده گردید.

از آنجا که روش حجم‌های محدود به عنوان یک روش CFD بدون تأیید و ارزیابی مراجع آزمایشی، تجربی و یا تحلیلی نمی‌تواند پیش‌بینی صحیحی برای متغیر تحت بررسی داشته باشد (دولتی ارده‌جانی و دیگران، ۱۳۸۴)، لذا در اینجا از داده‌های آزمایشگاهی و فرمول‌های تحلیلی برای اعتبارسنجی مدل عددی حجم‌های محدود استفاده شده است. در نهایت نتایج حاصل از مدل‌سازی عددی با نتایج به دست آمده از یک تحقیق در مقیاس آزمایشگاهی جهت جذب بیولوژیکی یون‌های مس و منگنز از زهاب اسیدی معدن مس سرچشمه با استفاده از گونه قارچی اسپرژیلوس نایجر در یک رآکتور پیوسته مقایسه شده و همپوشانی مناسبی به دست آمد. نتایج حاصل از تجزیه شیمیایی زهاب اسیدی معدن مس سرچشمه که از رودخانه شور تهیه شده بود، غلظت‌های ۸/۲۶۵ و ۱۰/۴۰۱ میلی‌گرم بر لیتر را برای یون‌های مس و منگنز نشان داده است (دولتی ارده‌جانی و دیگران، ۱۳۸۸).

در این تجربه آزمایشگاهی در داخل یک رآکتور پیوسته، جریان پیوسته از محلول (زهاب) حاوی یون فلزی از درون یک جاذب همگن تثبیت شده عبور داده شد. از آنجایی که ذرات بایومس در تماس با زهاب به هم می‌چسبند و راه خروج زهاب از ستون را سد می‌کنند، روی بستر آلژینات تثبیت شده‌اند. در این تحقیق منحنی رخنه یا نفوذ در حالات مختلف بررسی و ارائه شده است. نقطه نفوذ بالاترین حد

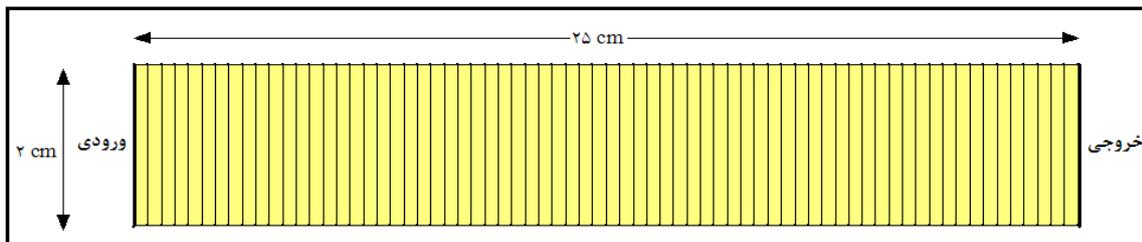
منحنی تغییرات غلظت نسبی در مقابل زمان است یعنی زمانی که ستون اشباع می‌شود، تغییرات غلظت بسیار ناچیز است و به سمت صفر میل می‌کند و توانایی جذب ستون از بین می‌رود. این نقطه بر روی نموداری که در آن تغییرات غلظت نسبی در مقابل زمان رسم می‌شود جایی است که نمودار موازی محور افقی می‌گردد و جذب ثابت شده و دیگر با گذشت زمان تغییر نمی‌کند. در زمان‌های مختلف جای این نقطه در منحنی تغییر می‌کند، زیرا در سرعت‌های بالاتر سریعتر این نقطه به دست می‌آید. با گذشت زمان، جاذب قدرت جذب خود را از دست می‌دهد و سطوح جذبی همگی پر می‌شوند و در نهایت جذب به صفر می‌رسد. عوامل زیادی مثل غلظت اولیه فلز، غلظت میکرواورگانیزم‌ها، طول ستون و دبی جریان ورودی زهاب بر روی جابجایی نقطه شکست مؤثر هستند (دولتی ارده‌جانی و دیگران، ۱۳۸۸).

#### ۴-۶- مدل سازی رآکتور پیوسته

در این تحقیق ستونی به طول ۲۵ و قطر ۲ سانتیمتر به عنوان رآکتور در نظر گرفته شده است. غلظت یون‌های فلزی به صورت نسبت غلظت در خروجی رآکتور به ورودی آن در نظر گرفته می‌شود (غلظت نسبی). یک منبع در ورودی برای اعمال سرعت و غلظت یون‌های فلزی زهاب تعریف می‌شود. در تمام طول مدل در حالتی که جذب وجود دارد، فرآیند جذب به صورت یک عبارت سینتیکی یا عبارت مصرف اعمال می‌شود. مدل سازی در مدت زمان ۶ ساعت و با در نظر گرفتن سه دبی ۲، ۴ و ۶ میلی لیتر بر دقیقه انجام گرفت. در ۲۴ گام زمانی یعنی هر ۱۵ دقیقه غلظت نسبی تخمین زده شد. مدل به ۱۰۰ مش و به صورت یک شبکه مستطیلی شبکه‌بندی گردیده است. روش دیفرانسیل‌گیری Upwind در فرآیند حل معادلات در تمام حالت‌ها استفاده شده است (شکل ۴-۷). مدل سازی در چهار حالت انجام شده است:

- در حالتی که جذب وجود ندارد.

- در حالی که جذب به صورت خطی است.
- در حالی که جذب به صورت غیرخطی است و از ایزوترم لانگمویر<sup>۱</sup> پیروی می‌کند.
- در حالی که جذب به صورت غیرخطی است و از سینتیک مرتبه دوم با در نظر گرفتن مدل یون-نلسون<sup>۲</sup> پیروی می‌کند.



شکل (۷-۴): مدل مربوط به ستون جذب و مش‌بندی مناسب در حالت یک‌بعدی

#### ۷-۴- بررسی رفتار رآکتور در حالات مختلف جذب یون‌های فلزی از زهاب

##### ۷-۴-۱- مدل‌سازی در حالت بدون فرآیند جذب

معادله دیفرانسیل حاکم بر انتقال یک آلاینده فلزی بدون لحاظ فرآیند جذب یا هر واکنش

شیمیایی دیگر به صورت رابطه (۴-۱۴) است:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + v_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (۴-۱۴)$$

که در آن:

$C$  = غلظت آلاینده محلول ( $mg/L$ ).

$D_x$  = پراکندگی هیدرودینامیکی ( $m^2/s$ ).

$v_x$  = سرعت انتقال آلودگی ( $m/s$ ).

<sup>۱</sup> Langmuir

<sup>۲</sup> Yoon-Nelson

$t =$  زمان ( $s$ ).

$x =$  مختصات مکانی ( $m$ ).

حل تحلیلی معادله (۴-۱۴) به صورت رابطه (۴-۱۵) است (Reddi and Inyang, 2000):

$$C = \frac{C_0}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left( \frac{x - v_x t}{\sqrt{4 D_x t}} \right) + \exp \left( \frac{v_x x}{D_x} \right) \operatorname{erfc} \left( \frac{x + v_x t}{\sqrt{4 D_x t}} \right) \right\} \quad (4-15)$$

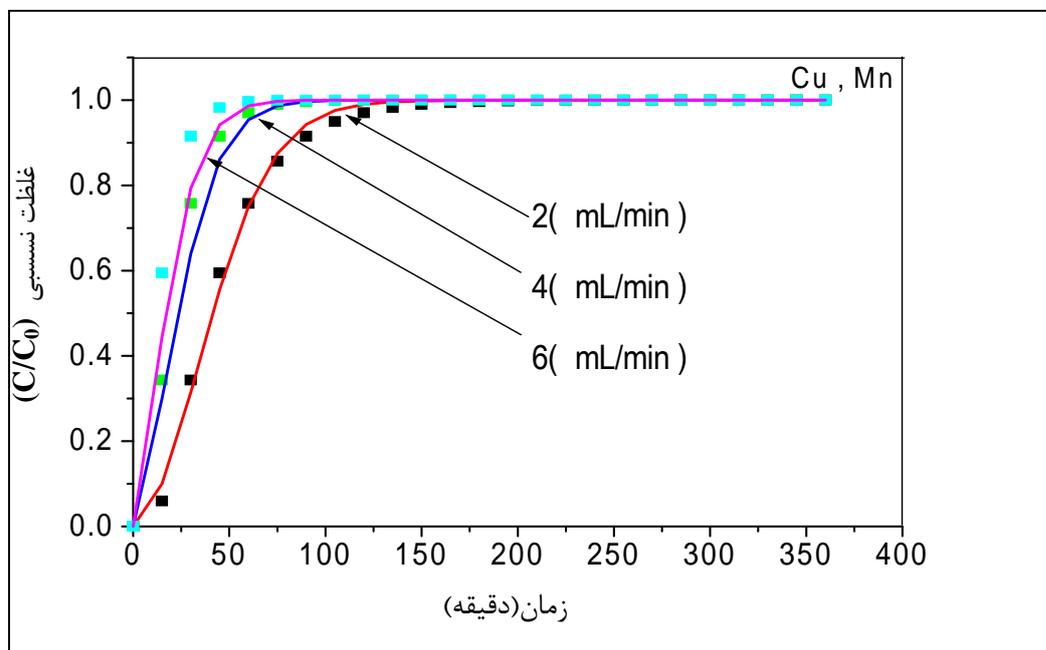
که در آن:

$C_0 =$  غلظت ورودی ماده آلاینده،

$\operatorname{erfc} =$  مکمل تابع خطا (Domenico and Schwartz, 1990).

منحنی‌های رخنه برای یون‌های فلزی  $\text{Cu}^{2+}$  یا  $\text{Mn}^{2+}$  در حالتی که جذب وجود ندارد به صورت

شکل (۴-۸) است.



شکل (۴-۸): مقایسه منحنی‌های رخنه حاصل از حل تحلیلی (نقاط) و مدل‌سازی عددی (خطوط) در سه دبی برای یون‌های فلزی  $\text{Cu}^{2+}$  یا  $\text{Mn}^{2+}$  بدون فرآیند جذب

همانطور که از شکل (۴-۸) دیده می‌شود، تطابق خوبی بین نتایج حاصل از مدل‌سازی عددی و رابطه تحلیلی در حالتی که ستون خالی از جاذب است وجود دارد. آلاینده محلول تحت دبی‌های ۲، ۴ و ۶ میلی لیتر بر دقیقه به ترتیب پس از زمان‌های ۱۳۰، ۸۰ و ۶۰ دقیقه به نقطه شکست می‌رسد. در واقع در این زمان‌ها زهاب طول رآکتور را با دبی‌های مذکور طی کرده و محیط را آلوده می‌سازد.

#### ۴-۷-۲- مدل‌سازی در حالت فرآیند جذب خطی

معادله دیفرانسیل حاکم بر انتقال آلاینده با در نظر گرفتن فرآیند جذب خطی به صورت رابطه

(۴-۱۶) است:

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + v_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (۴-۱۶)$$

که در آن:

$C$  = غلظت آلاینده محلول ( $mg/L$ ),

$D_x$  = پراکندگی هیدرودینامیکی ( $m^2/s$ ),

$v_x$  = سرعت انتقال آلودگی ( $m/s$ ),

$t$  = زمان ( $s$ ),

$x$  = مختصات مکانی ( $m$ ) و

$R$  = عامل تأخیر<sup>۱</sup> نامیده می‌شود.

حل تحلیلی معادله (۴-۱۶) به صورت رابطه (۴-۱۷) است (Reddi and Inyang, 2000):

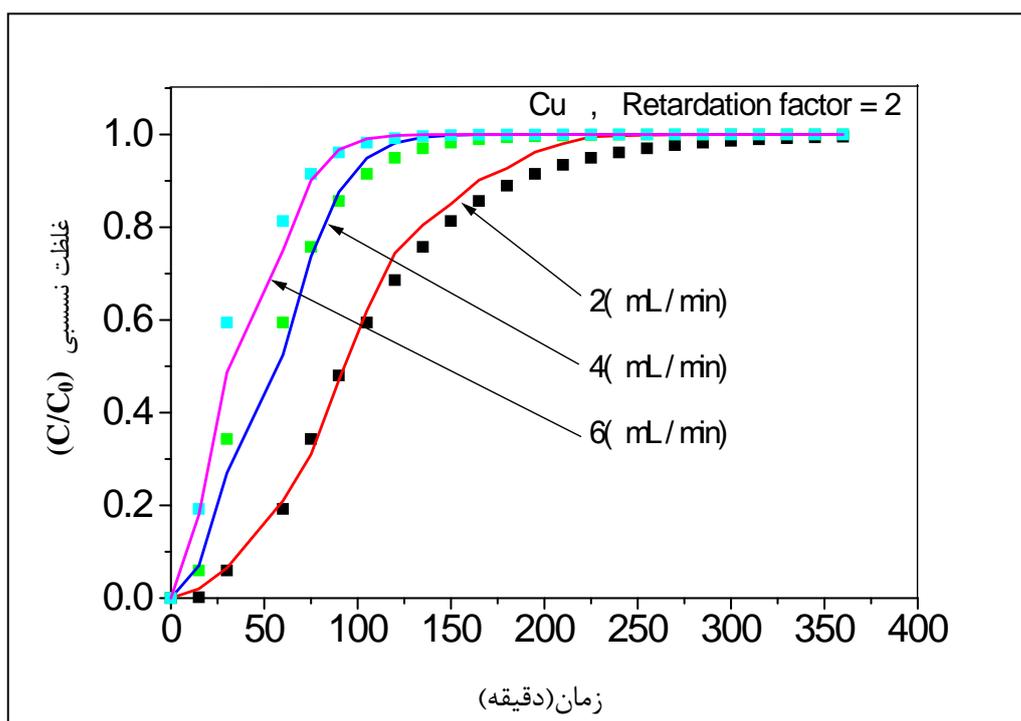
$$C = \frac{C_0}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left( \frac{Rx - v_x t}{\sqrt{4RD_x t}} \right) + \exp \left( \frac{v_x x}{D_x} \right) \operatorname{erfc} \left( \frac{Rx + v_x t}{\sqrt{4RD_x t}} \right) \right\} \quad (۴-۱۷)$$

<sup>۱</sup> Retardation factor

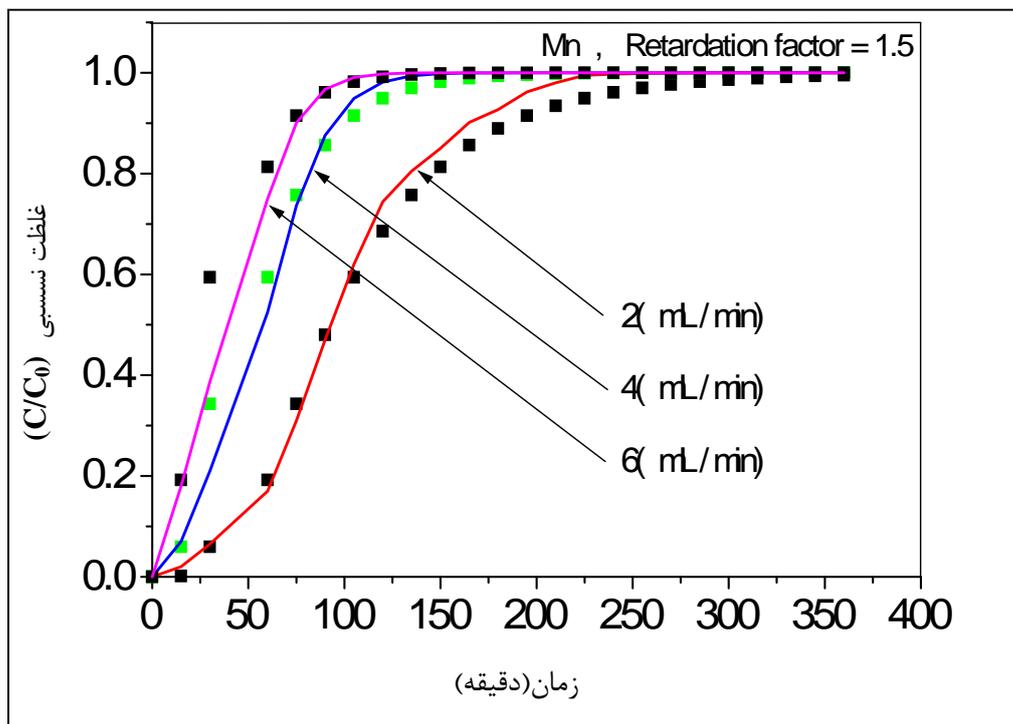
همانطور که از رابطه (۴-۱۷) دیده می‌شود، عامل تأخیر باعث می‌شود تا آلاینده نسبت به حالتی که جاذب در محیط وجود ندارد، با تأخیر به نقطه شکست برسد. در واقع این عامل مقدارش بزرگتر از یک است و وقتی پارامترهای سرعت و پراکندگی همزمان با این عامل در نظر گرفته می‌شوند درست مثل این است که از یک سرعت و ضریب پراکندگی کوچکتری در مدل‌سازی استفاده شده باشد.

عامل تأخیر یا R برای یون‌های فلزی مس و منگنز به ترتیب برابر ۲ و ۱/۵ در نظر گرفته شده است (دولتی ارده‌جانی و شفایی تنکابنی، ۱۳۸۸).

منحنی‌های رخنه برای یون‌های فلزی  $\text{Cu}^{2+}$  و  $\text{Mn}^{2+}$  برای حالتی که جذب به صورت خطی است به ترتیب در شکل‌های (۴-۹) و (۴-۱۰) نشان داده شده است.



شکل (۴-۹): مقایسه منحنی‌های رخنه حاصل از فرمول تحلیلی (۴-۱۷) (نقاط) و مدل‌سازی عددی (خطوط) در سه دبی مختلف برای یون فلزی  $\text{Cu}^{2+}$  در حالت جذب خطی



شکل (۴-۱۰): مقایسه منحنی‌های رخنه حاصل از فرمول تحلیلی (۴-۱۷) و مدل‌سازی عددی (خطوط) در سه دبی مختلف برای یون فلزی  $Mn^{2+}$  در حالت جذب خطی

همانطور که از شکل‌های (۴-۹) و (۴-۱۰) دیده می‌شود تطابق خوبی بین نتایج مدل‌سازی عددی و رابطه تحلیلی در حالتی که جذب در داخل ستون به صورت خطی فرض می‌گردد وجود دارد. در واقع در این حالت تنها منحنی‌های رخنه مقداری به سمت راست شیفت پیدا کرده و منحنی‌های رخنه با اعمال عامل تأخیر، مقداری دیرتر (همراه با تأخیر) به بیشینه خود می‌رسند و در دبی‌های ۲، ۴ و ۶ میلی‌لیتر بر دقیقه منحنی‌های رخنه مربوط به فلز مس به ترتیب پس از زمان‌های ۲۳۰، ۱۳۵ و ۱۰۰ دقیقه به نقطه شکست می‌رسد. در همین دبی‌ها، منحنی‌های رخنه مربوط به فلز منگنز به ترتیب پس از زمان‌های ۲۲۰، ۱۲۵ و ۹۵ دقیقه به نقطه شکست می‌رسد. در واقع فلز منگنز تا حدی زودتر به نقطه شکست می‌رسد و این نشان می‌دهد که جذب آن نسبت به فلز مس کمتر است ( $R_{Mn} < R_{Cu}$ ).

## ۴-۷-۳- مدل سازی با اعمال ایزوترم جذب غیرخطی لانگمویر

یکی از متداول‌ترین مدل‌های ایزوترم غیرخطی جذب، مدل لانگمویر می‌باشد که به صورت رابطه

(۱۸-۴) بیان می‌گردد (Doulati Ardejani et al., 2008b; Sheng and Smith, 1997):

$$\bar{C} = \frac{Q_0 K_L C}{1 + K_L C} \quad (18-4)$$

که در آن:

$\bar{C}$  = مقدار جرمی که جذب می‌شود (mg/g)،

$C$  = غلظت تعادلی (mg/L)،

$Q_0$  = بیشترین ظرفیت جذب (mg/g)،

$K_L$  = ثابت لانگمویر (L/mg).

معادله دیفرانسیل جزئی مرتبه دوم که انتقال یک آلاینده را در سیستم جریان آب زیرزمینی بیان

می‌کند و هر دو فرآیند فیزیکی (پهنرفت و پراکندگی) و شیمیایی مانند جذب در انتقال و رقیق‌سازی

آلاینده سهیم می‌باشند، به صورت رابطه (۱۹-۴) است (Jenning et al., 1982):

$$n \frac{\partial C}{\partial t} + \rho_b \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - q_j \frac{\partial C}{\partial x} + q_{re} C_i \pm S \quad (19-4)$$

که در آن:

$C_i$  = غلظت آلاینده در فاز محلول ( $mol/m^3$ )،

$t$  = زمان (s)،

$x$  = فاصله در جهت (m)،

$\bar{C}_i$  = مقدار آلاینده جذب شده در محیط متخلخل (m.e./g)،

$\rho_b$  = چگالی حجمی محیط ( $gr/cm^3$ ).

$q_j =$  مؤلفه برداری سرعت دارسی ( $m/s$ ) که توسط رابطه  $v_j = \frac{q_j}{n}$  با سرعت متوسط خطی در ارتباط

است،

$$n = \text{تخلخل محیط } (/),$$

$$v_j = \text{سرعت متوسط خطی } (m/s),$$

$$D_x = \text{پراکندگی هیدرودینامیکی } (m^2/s),$$

$$q_{re} = \text{نرخ بارش سطحی } (m/s),$$

$S =$  عبارت مصرف و یا تولید برای آلاینده محلول ( $mol/m^3s$ ) است.

اگر رابطه بین غلظت آلاینده در فاز محلول،  $C_i$ ، و مقدار آن در سطوح جاذب،  $\bar{C}_i$ ، مطابق رابطه (۴-۲۰) باشد:

$$\frac{\partial \bar{C}_i}{\partial t} = \frac{\partial \bar{C}_i}{\partial C_i} \frac{\partial C_i}{\partial t} \quad (۴-۲۰)$$

حال با جایگذاری رابطه (۴-۲۰) در رابطه (۴-۱۹)، رابطه (۴-۲۱) به دست می‌آید:

$$n \frac{\partial C}{\partial t} + \rho_b \left( \frac{\partial \bar{C}_i}{\partial C_i} \frac{\partial C_i}{\partial t} \right) = D_x \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} - q_j \frac{\partial C_i}{\partial x} + q_{re} C_i \pm S \quad (۴-۲۱)$$

همچنین با دیفرانسیل‌گیری از رابطه (۴-۱۸)، رابطه (۴-۲۲) به دست می‌آید:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial C} = \frac{Q_0 K_l}{(1 + K_l C)^2} \quad (۴-۲۲)$$

با جایگذاری رابطه (۴-۲۲) در رابطه (۴-۲۱)، رابطه (۴-۲۳) به دست می‌آید:

$$n \frac{\partial C_i}{\partial t} + \rho_b \frac{Q_0 K_l}{(1 + K_l C)^2} \frac{\partial C_i}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} - q_j \frac{\partial C_i}{\partial x} + q_{re} C_i \pm S \quad (۴-۲۳)$$

رابطه (۴-۲۳) را می‌توان به صورت رابطه (۴-۲۴) مرتب کرد:

$$n \frac{\partial C_i}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C_i}{\partial^2 x} - q_j \frac{\partial C_i}{\partial x} + q_{re} C_i - \rho_b \frac{Q_0 K_l}{(1 + K_l C)^2} \frac{\partial C_i}{\partial t} \pm S \quad (24-4)$$

اگر عبارت  $\frac{\partial C_i}{\partial t}$  به طرفین رابطه (۲۴-۴) اضافه گردد، پس از مرتب سازی نتیجه به شکلی که برای نرم

افزار مناسب باشد، به صورت رابطه (۲۵-۴) می‌باشد:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C_i}{\partial^2 x} - q_j \frac{\partial C_i}{\partial x} + q_{re} C_i + (1-n) \frac{\partial C_i}{\partial t} - \rho_b \frac{Q_0 K_l}{(1 + K_l C)^2} \frac{\partial C_i}{\partial t} \pm S \quad (25-4)$$

رابطه (۲۵-۴) یک رابطه کلی است و تمام عبارتها در آن در نظر گرفته شده است. در این قسمت رابطه

(۲۶-۴) که جهت اعمال ایزوترم لانگمویر است، توسط نرم افزار PHOENICS حل شده است.

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C_i}{\partial^2 x} - q_j \frac{\partial C_i}{\partial x} - \frac{1}{n} \rho_b \frac{Q_0 K_l}{(1 + K_l C)^2} \frac{\partial C_i}{\partial t} \quad (26-4)$$

عبارت مصرف در رابطه (۲۵-۴) که یک عبارت مصرف غیر خطی است، با استفاده از کدنویسی به

زبان فترن در زیر برنامه GROUND نرم افزار PHOENICS به معادله اساسی نرم افزار افزوده شده

است. مدل سازی با استفاده از روش Upwind با در نظر گرفتن ۲۰۰۰ تکرار حل شده است. در رابطه

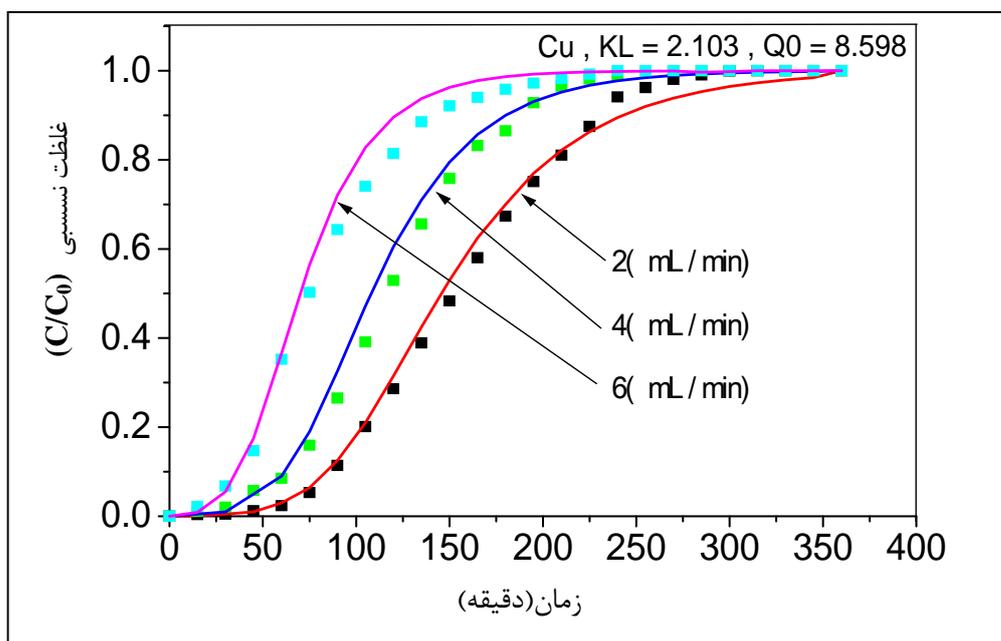
(۲۶-۴) مقدار  $\rho_b$  که بیانگر چگالی حجمی محیط است، برابر  $2/8 \text{ (gr/cm}^3\text{)}$  در آزمایشگاه تعیین شده

است (دولتی ارده جانی و دیگران، ۱۳۸۸). در حالتی که فرآیند جذب از مدل ایزوترم غیرخطی لانگمویر

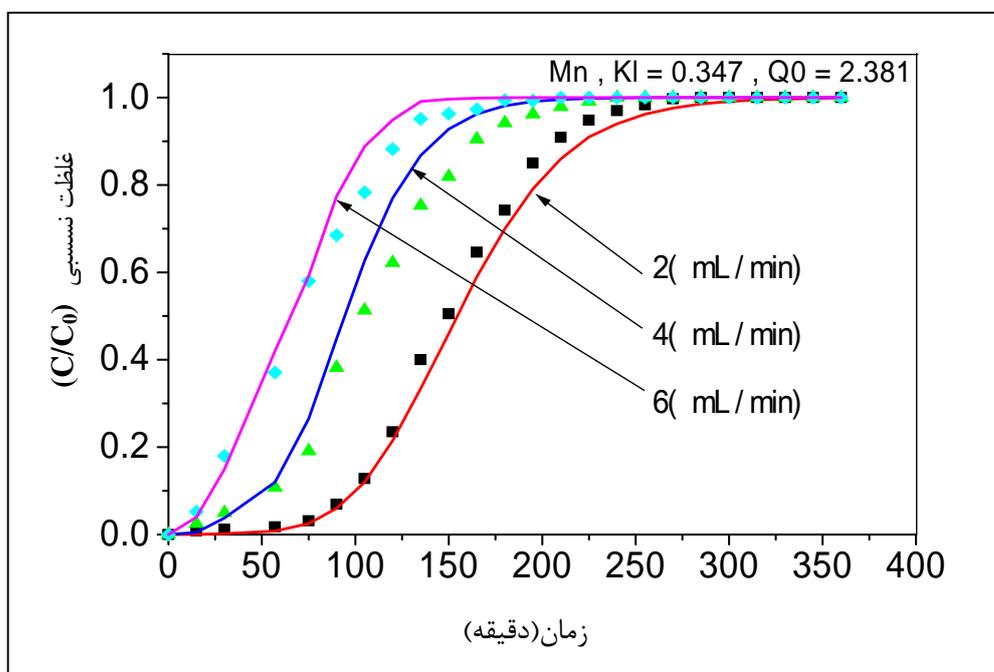
تبعیت می‌کند، از داده‌های آزمایشگاهی برای اعتبارسنجی مدل عددی استفاده می‌شود. نتایج آزمایشگاهی

و مدل سازی عددی برای منحنی‌های رخنه مربوط به جذب بیولوژیکی یون‌های فلزی  $\text{Mn}^{2+}$  و  $\text{Cu}^{2+}$

به ترتیب در شکل‌های (۱۱-۴) و (۱۲-۴) نشان داده شده است.



شکل (۴-۱۱): مقایسه منحنی‌های رخنه حاصل از نتایج آزمایشگاهی (نقاط) (دولتی ارده‌جانی و دیگران، ۱۳۸۸) و مدل‌سازی عددی (خطوط) در سه دبی مختلف برای یون فلزی  $Cu^{2+}$  در حالت جذب غیرخطی با مدل لانگمویر



شکل (۴-۱۲): مقایسه منحنی‌های رخنه حاصل از نتایج آزمایشگاهی (نقاط) (دولتی ارده‌جانی و دیگران، ۱۳۸۸) و مدل‌سازی عددی (خطوط) در سه دبی مختلف برای یون فلزی  $Mn^{2+}$  در حالت جذب غیرخطی با مدل لانگمویر

همانطور که از شکل‌های (۴-۱۱) و (۴-۱۲) دیده می‌شود، تطابق خوبی بین نتایج مدل عددی و داده‌های آزمایشگاهی در حالتی که جذب در داخل ستون به صورت غیرخطی است، وجود دارد. در واقع در این حالت هم منحنی‌های رخنه مقدار بیشتری نسبت به جذب خطی به سمت راست شیفت پیدا کرده و منحنی‌های رخنه با اعمال ایزوترم غیرخطی لانگمویر باز هم مقداری دیرتر به بیشینه خود می‌رسند و در دبی‌های ۲، ۴ و ۶ میلی لیتر بر دقیقه منحنی‌های رخنه مربوط به فلز مس به ترتیب پس از زمان‌های ۳۵۵، ۲۷۵ و ۲۰۵ دقیقه به نقطه شکست می‌رسد. در همین دبی‌ها، منحنی‌های مربوط به فلز منگنز به ترتیب پس از زمان‌های ۳۰۰، ۲۰۰ و ۱۵۰ دقیقه به نقطه شکست می‌رسد. در واقع در این حالت باز هم فلز منگنز تا حدی زودتر نسبت به فلز مس به نقطه شکست می‌رسد و این نشان می‌دهد که جذب گونه قارچی آسپرژیلوس نایجر برای منگنز نسبت به فلز مس کمتر است.

#### ۴-۷-۴- سینتیک جذب غیرخطی یون-نلسون

یکی از متداول‌ترین مدل‌های سینتیک جذب غیرخطی شبه مرتبه دوم، مدل Yoon-Nelson می‌باشد که به صورت رابطه (۴-۲۵) بیان می‌گردد (Doulati Ardejani et al., 2008b):

$$\frac{t}{q_t} = \frac{1}{k_2 q_e^2} + \frac{1}{q_e} (t) \quad (4-27)$$

که در آن:

$$K_2 = \text{ثابت سرعت شبه مرتبه دوم (min}^{-1}\text{)},$$

$$q_e = \text{مقدار آلاینده جذب شده در حالت تعادل (mg/g)},$$

$$q_t = \text{مقدار آلاینده جذب شده در زمان } t \text{ (mg/g)},$$

$$t = \text{زمان (min)}.$$

برای اعمال مدل جذب سینتیکی یون- نلسون باید تغییرات مقدار آلاینده جذب شده در زمان  $t$  (یعنی  $q_t$ ) برحسب  $mg/g$  در معادله دیفرانسیل جزئی حاکم وارد شود، لذا رابطه مناسب برای مدل یون- نلسون به صورت معادله (۲۸-۴) است:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} - q_j \frac{\partial C_i}{\partial x} - \rho_b \frac{\partial q_t}{\partial t} \quad (28-4)$$

با دیفرانسیل‌گیری از رابطه (۲۷-۴)، رابطه (۲۹-۴) به دست می‌آید که برای اعمال عبارت  $\frac{\partial q_t}{\partial t}$  در معادله (۲۸-۴) به کار برده می‌شود.

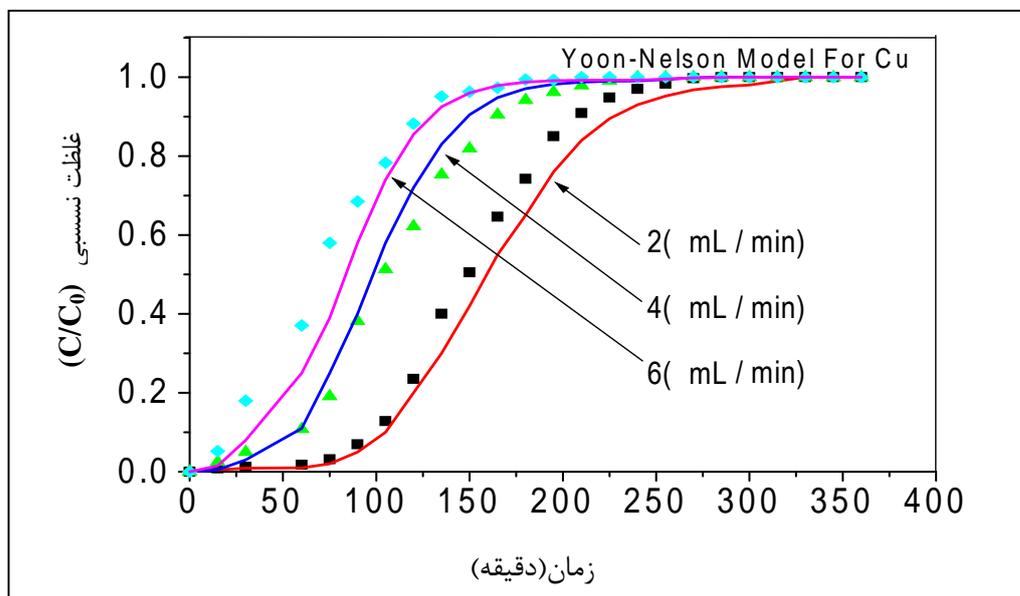
$$\frac{\partial q_t}{\partial t} = \frac{K_2 q_e^2}{(1 + K_2 q_e t)^2} \quad (29-4)$$

حال با جایگذاری رابطه (۲۹-۴) در رابطه (۲۸-۴) می‌توان رابطه مناسب را برای اعمال مدل جذب سینتیکی غیرخطی شبه مرتبه دوم یون-نلسون و همچنین منطبق با معادله اساسی نرم افزار PHOENICS به صورت رابطه (۳۰-۴) به دست آورد:

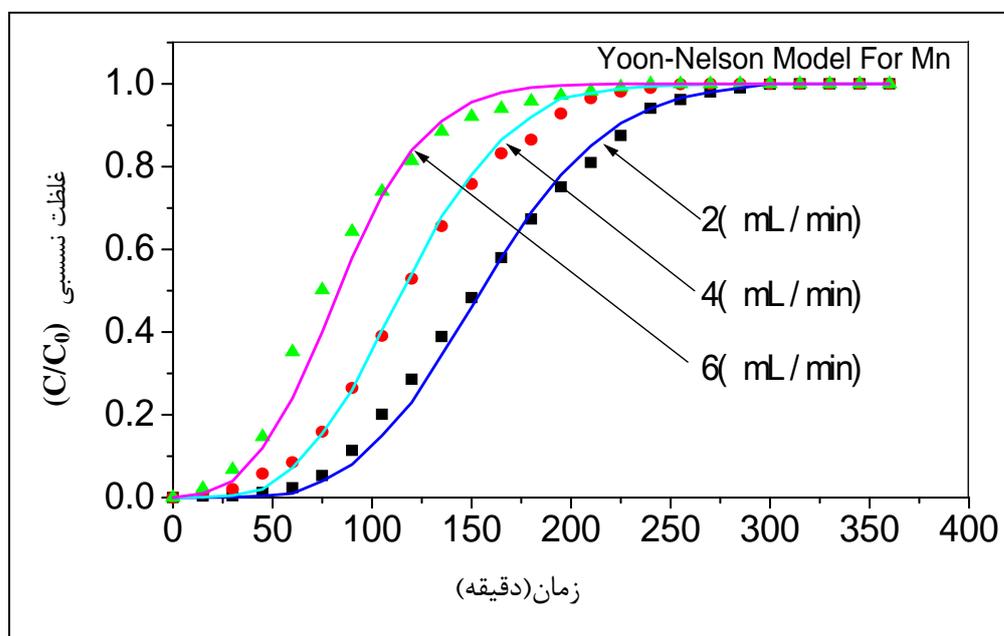
$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} - q_j \frac{\partial C_i}{\partial x} - \rho_b \frac{K_2 q_e^2}{(1 + K_2 q_e t)^2} \quad (30-4)$$

عبارت مصرف در رابطه (۳۰-۴) که یک عبارت مصرف غیر خطی است، با استفاده از کدنویسی به زبان فرترن در زیر برنامه GROUND نرم افزار PHOENICS به معادله اساسی نرم افزار افزوده شده است. همانند حالت قبل، مدل‌سازی با استفاده از روش Upwind با در نظر گرفتن ۲۰۰۰ تکرار حل شده است. با توجه به این که در این حالت نیز مانند مدل لانگمویر حل تحلیلی وجود ندارد، لذا مانند مدل لانگمویر از داده‌هایی که در آزمایشگاه اندازه‌گیری شده است برای اعتبارسنجی مدل عددی استفاده می‌شود. منحنی رخنه در حالتی که جذب به صورت غیرخطی است برای یون‌های فلزی  $Mn^{2+}$  و  $Cu^{2+}$  به صورت شکل‌های (۱۳-۴) و (۱۴-۴) است. زمان تعادل ۶۰ دقیقه برای مدل Yoon - Nelson در

آزمایشگاه به دست آمده است (دولتی ارده‌جانی و دیگران، ۱۳۸۸).



شکل (۴-۱۳): مقایسه منحنی‌های رخنه حاصل از نتایج آزمایشگاهی (نقاط) (دولتی ارده‌جانی و دیگران، ۱۳۸۸) و مدل سازی عددی (خطوط) در سه دبی مختلف برای یون فلزی  $\text{Cu}^{2+}$  در حالت جذب غیرخطی با مدل یون-نلسون



شکل (۴-۱۴): مقایسه منحنی‌های رخنه حاصل از نتایج آزمایشگاهی (نقاط) (دولتی ارده‌جانی و دیگران، ۱۳۸۸) و مدل سازی عددی (خطوط) در سه دبی مختلف برای یون فلزی  $\text{Mn}^{2+}$  در حالت جذب غیرخطی با مدل یون-نلسون

همانطور که از شکل‌های (۴-۱۳) و (۴-۱۴) دیده می‌شود تطابق خوبی بین مدل عددی و داده‌های آزمایشگاهی در حالتی که جذب در داخل ستون به صورت غیرخطی و تابع مدل یون-نلسون است وجود دارد. همانطور که از رابطه (۴-۳۰) دیده می‌شود، مدل سینتیکی یون-نلسون به همراه یک عامل تأخیر در نظر گرفته می‌شود. عامل تأخیر برای مس و منگنز به ترتیب ۲ و ۱/۵ در نظر گرفته شده است. در واقع در این حالت هم منحنی‌های رخنه مقدار بیشتری نسبت به جذب خطی به سمت راست شیفت پیدا کرده و منحنی‌های رخنه با اعمال سینتیک شبه مرتبه دوم بازهم مقداری دیرتر به بیشینه خود می‌رسند و در دبی‌های ۲، ۴ و ۶ میلی لیتر بر دقیقه منحنی‌های رخنه مربوط به فلز مس به ترتیب پس از زمان‌های ۳۲۵، ۲۵۵ و ۲۰۵ دقیقه به نقطه شکست می‌رسد. در همین دبی‌ها منحنی مربوط به فلز منگنز به ترتیب پس از زمان‌های ۲۸۵، ۱۹۰ و ۱۶۵ دقیقه به نقطه شکست می‌رسد. در واقع در این حالت باز هم فلز منگنز تا حدی زودتر به نقطه شکست می‌رسد و این نشان می‌دهد که جذب گونه قارچی آسپرژیلوس نایجر برای منگنز نسبت به فلز مس کمتر است.

#### ۴-۸- آنالیز حساسیت

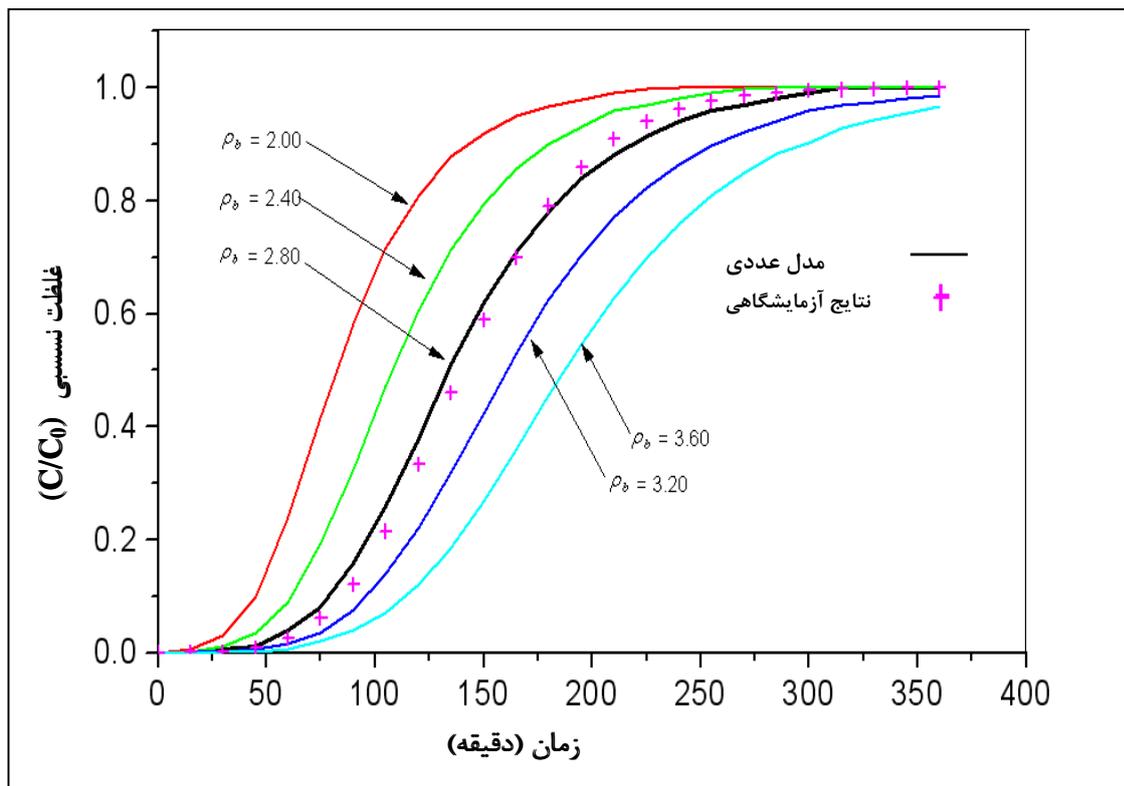
آنالیز حساسیت بر روی یک مدل به این صورت انجام می‌شود که پارامترهای موجود و مشخص در یک مدل بخصوص را یک به یک تغییر داده و به این شکل رفتار مدل را در اثر تغییر آن پارامتر بخصوص و ثابت مانند پارامترهای دیگر بررسی می‌کنند. به عنوان مثال، تغییر مقدار پارامترها در مدل لانگمویر درست مثل تغییر جاذب است، یعنی اگر مقدار پارامترها برای جاذب‌های دیگر موجود باشد، می‌توان رفتار مدل آن نوع جاذب را با آنالیز حساسیت بررسی نمود، به طوری که دیگر نیازی به تکرار کار آزمایشگاهی و صرف هزینه و زمان نیست.

در واقع آنالیز حساسیت راهی برای بهینه‌سازی در مدل‌سازی مسائل زیست محیطی است. در ادامه

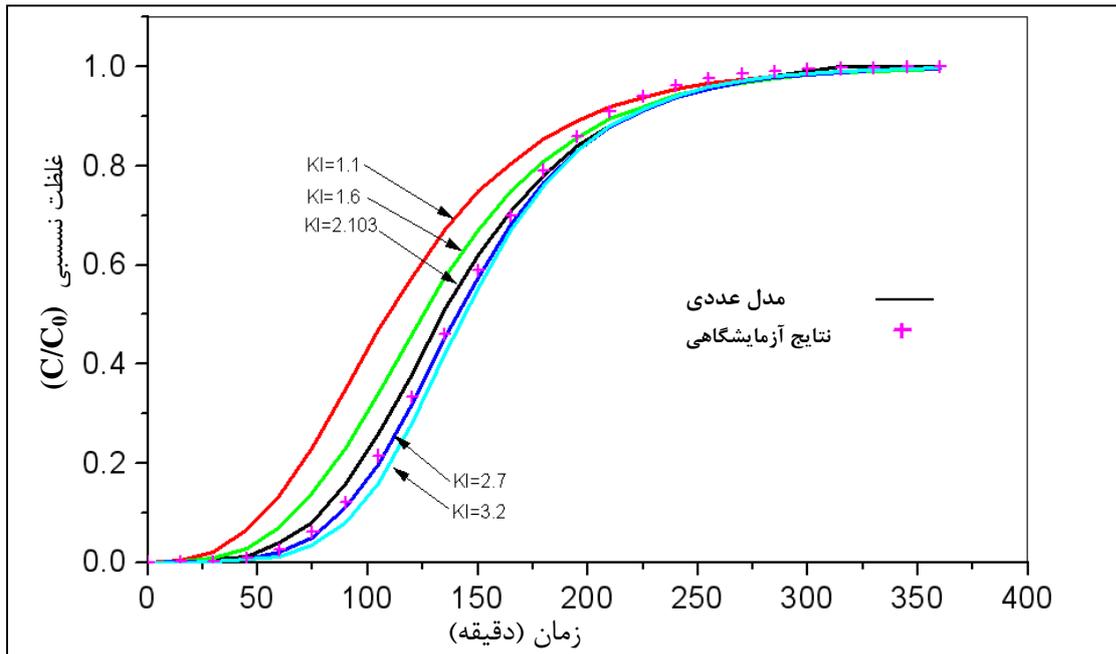
نتایج آنالیز حساسیت برای پارامترهای به مدل‌های لانگمویر و یون - نلسون آورده شده است و همچنین تأثیر تغییر طول مدل بررسی شده است.

#### ۴-۸-۱- آنالیز حساسیت بر روی پارامترهای ایزوترم جذب غیر خطی مدل لانگمویر

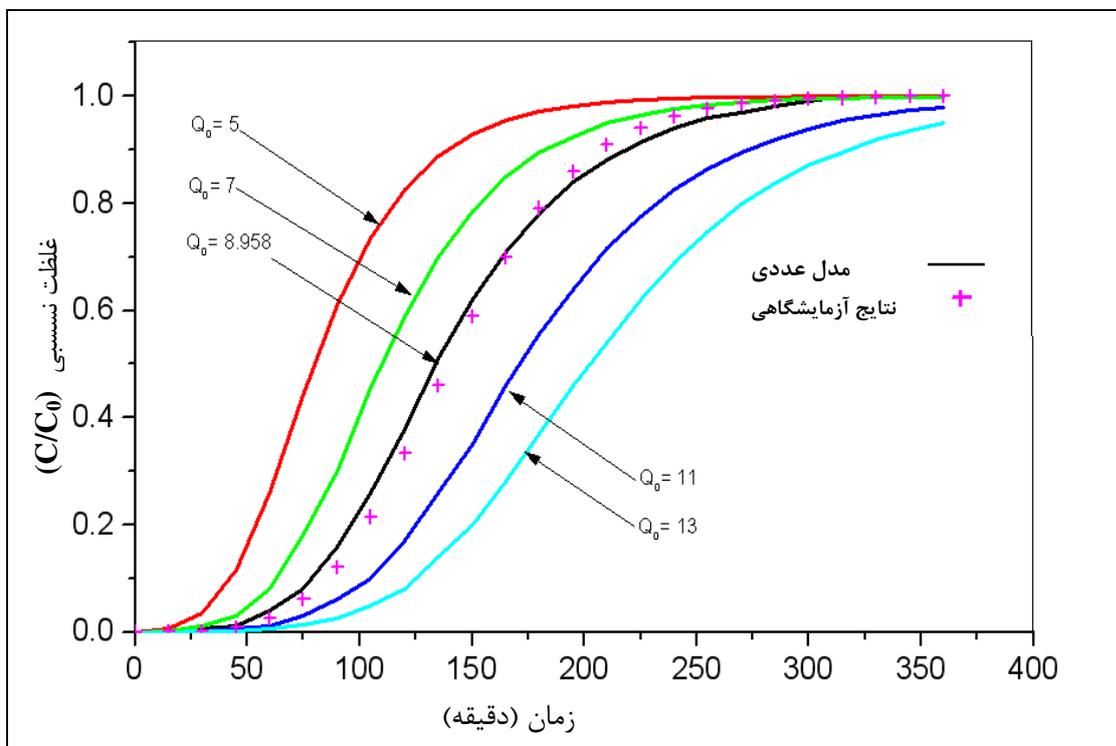
همانطور که گفته شد مدل لانگمویر با رابطه (۴-۱۸) بیان می‌شود و به صورت رابطه (۴-۲۶) در معادله معادله دیفرانسیل جزئی حاکم وارد می‌شود. در مدل لانگمویر پارامترهای  $Q_0$  بیشترین ظرفیت جذب،  $K_1$  ثابت لانگمویر و  $\rho_b$  چگالی بالک جاذب است. در شکل‌های (۴-۱۵) تا (۴-۱۷) تغییرات این سه پارامتر و تأثیر تغییرات آنها بر میزان جذب در مدل لانگمویر آمده است.



شکل (۴-۱۵): بررسی تأثیر تغییر چگالی بالک ( $\rho_b$ ,  $gr/cm^3$ ) بر میزان جذب در مدل ایزوترم لانگمویر



شکل (۴-۱۶): بررسی تأثیر تغییر ثابت لانگمویر ( $K_1$ ) بر میزان جذب در مدل ایزوترم لانگمویر

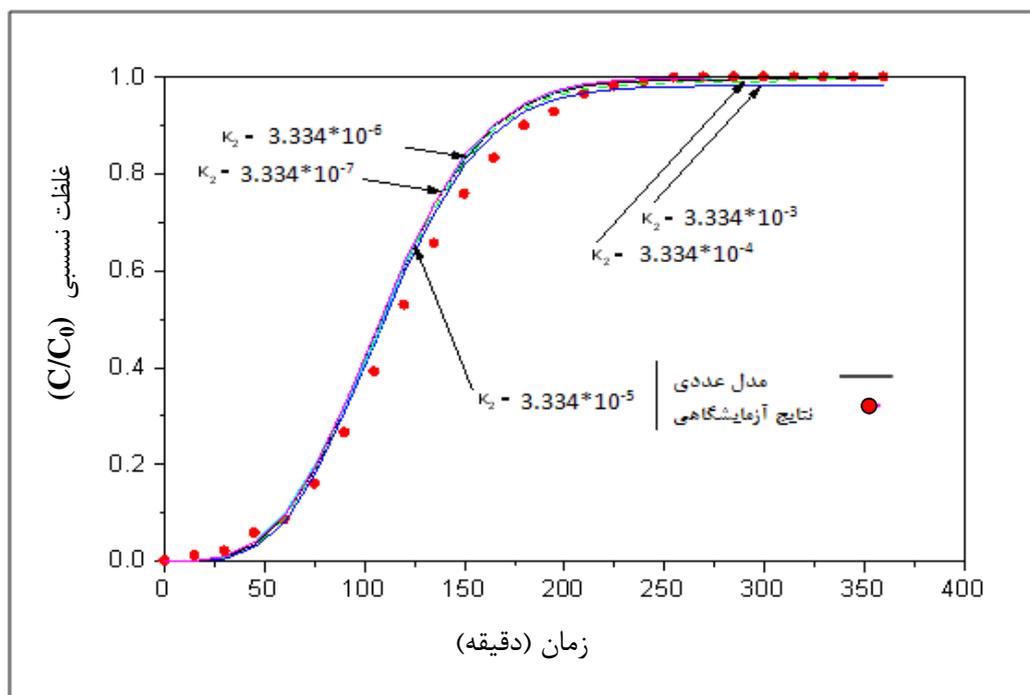


شکل (۴-۱۷): بررسی تأثیر تغییر بیشترین ظرفیت جذب ( $Q_0$ ) بر میزان جذب در مدل ایزوترم لانگمویر

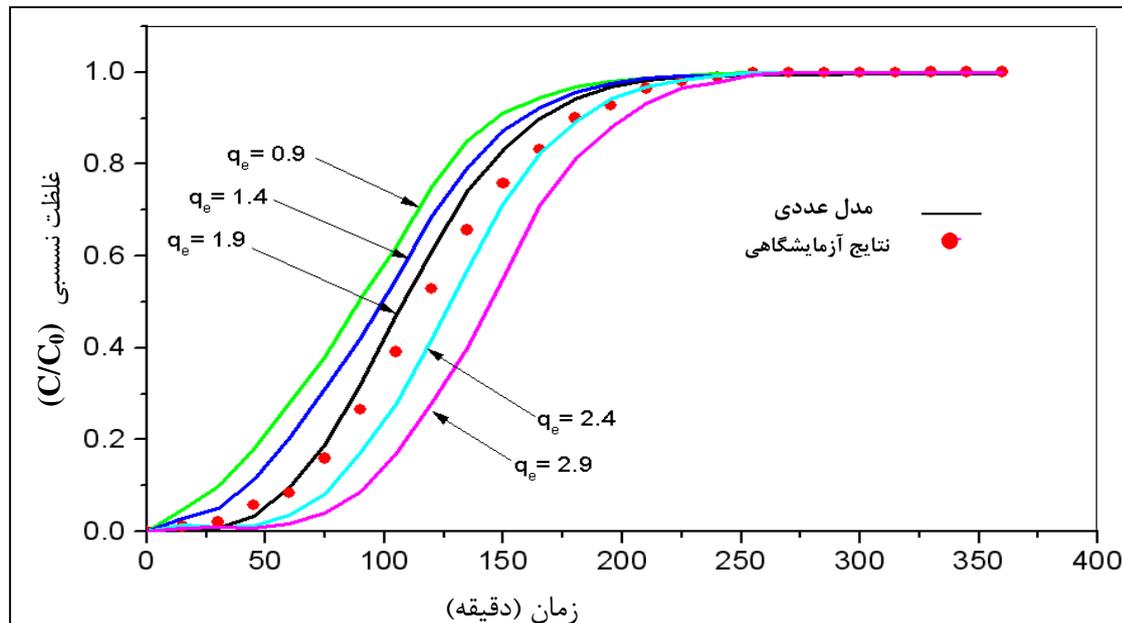
همانطور که از شکل‌های (۴-۱۵) تا (۴-۱۷) دیده می‌شود، با افزایش بیشترین ظرفیت جذب ( $Q_0$ )، ثابت لانگمویر ( $K_1$ ) و چگالی بالک جاذب ( $\rho_b$ ) مقدار جذب توسط جاذب افزایش می‌یابد. البته تأثیر پارامترهای  $Q_0$  و  $\rho_b$  بیشتر از پارامتر  $K_1$  است. در واقع تأثیر پارامتر  $K_1$  به صورت مستقیم است هر چند که تأثیر آن بیشتر مربوط به زمان‌های اولیه است.

#### ۴-۸-۲- آنالیز حساسیت بر روی پارامترهای سینتیک جذب غیرخطی مدل یون-نلسون

همانطور که گفته شد مدل یون-نلسون از رابطه (۴-۲۷) تبعیت می‌کند و به صورت رابطه (۴-۳۰) در معادله دیفرانسیل جزئی حاکم وارد می‌شود. در مدل یون-نلسون پارامترهای  $K_2$  ثابت سرعت شبه مرتبه دوم،  $q_e$  مقدار آلاینده جذب شده در حالت تعادل و  $\rho_b$  چگالی بالک جاذب است. اثر تغییرات  $\rho_b$  درست مانند مدل لانگمویر است. در شکل‌های (۴-۱۸) و (۴-۱۹) تأثیر تغییرات  $K_2$  و  $q_e$  بر مدل یون-نلسون آمده است.



شکل (۴-۱۸): بررسی تأثیر تغییر ثابت سرعت ( $K_2$ ) بر میزان جذب در مدل سینتیکی یون-نلسون



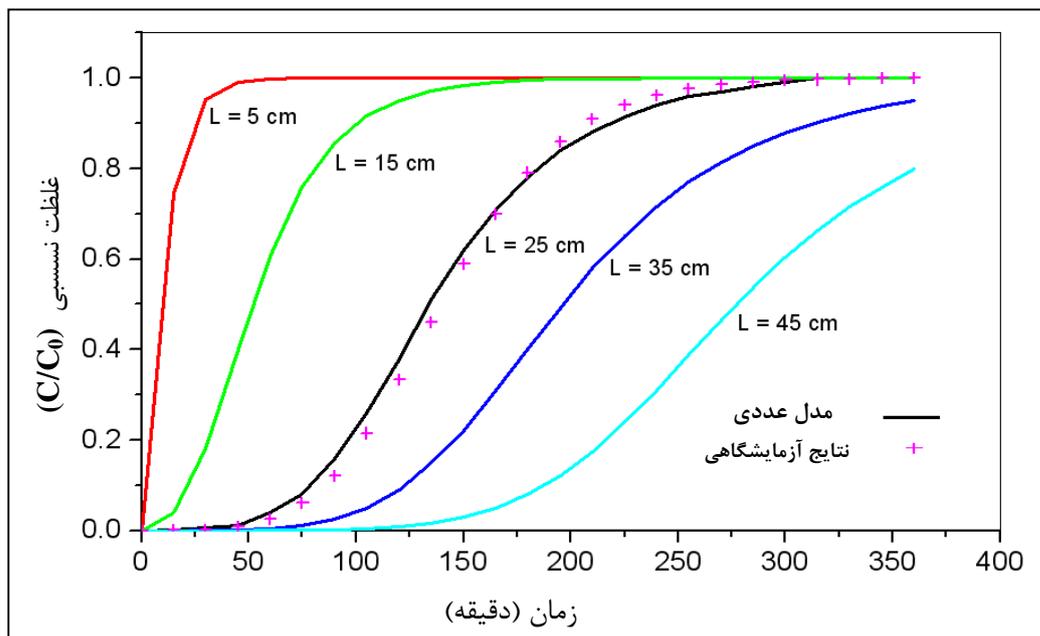
شکل (۴-۱۹): بررسی تأثیر تغییر جذب تعادلی ( $q_e$ ) بر میزان جذب در مدل سینتیکی یون-نلسون

همانطور که از شکل (۴-۱۸) دیده می‌شود تغییر پارامتر  $K_2$  به این صورت است که افزایش  $K_2$  به صورت بسیار ناچیزی میزان جذب را افزایش می‌دهد. از شکل (۴-۱۹) هم دیده می‌شود که افزایش  $q_e$  میزان جذب را افزایش داده و راندمان رآکتور را بالا می‌برد.

#### ۴-۸-۳- آنالیز حساسیت طول رآکتور یا بررسی تغییر طول رآکتور بر میزان جذب

میزان جذب توسط جاذب با تغییر طول مدل متغیر است. روند تغییر مقدار جذب در شکل (۴-۲۰) نشان داده شده است.

همانطور که از شکل (۴-۲۰) دیده می‌شود، میزان جذب توسط جاذب با افزایش طول مدل افزایش می‌یابد. در واقع می‌توان گفت که اگر طول مدل ۵ برابر شود، زمان رسیدن به نقطه شکست بیش از ۶ برابر افزایش می‌یابد.



شکل (۴-۲۰): بررسی تأثیر تغییر طول رآکتور بر میزان جذب

## فصل پنجم

**مدل سازی عددی انتقال آلاینده‌های  
فلزی ناشی از تولید زهاب اسیدی در  
رودخانه شور، معدن مس سرچشمه –  
پیش‌بینی مدل**

## ۵-۱- مقدمه

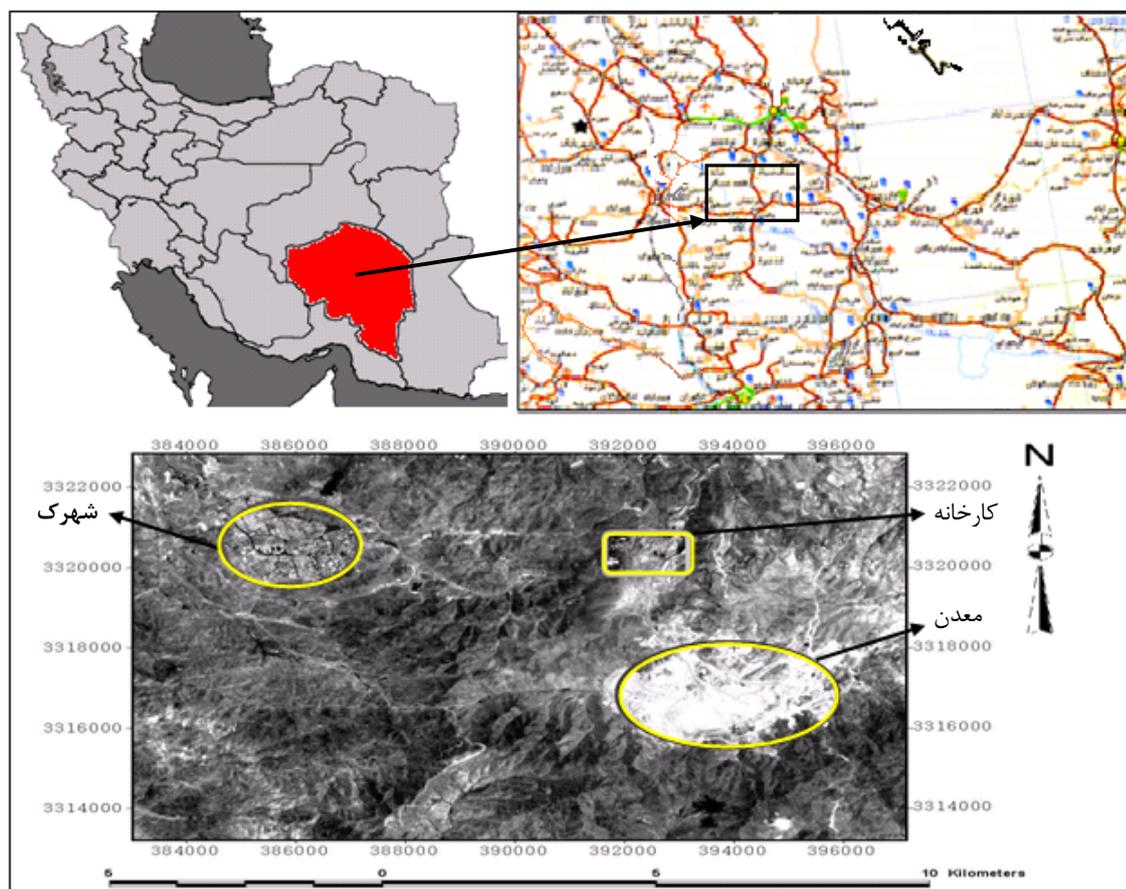
پس از اینکه مدل عددی ارائه شده در این تحقیق کالیبره گردید، سپس مدل جهت پیش‌بینی فرآیندهای انتقال آلاینده‌های مختلف در درون رودخانه شور، معدن مس سرچشمه مورد استفاده قرار گرفت. در این قسمت ابتدا مشخصات زمین‌شناسی، مشخصات عمومی معدن، نتایج آنالیز نمونه‌ها و موقعیت نمونه‌ها آورده شده است. سپس روند تغییرات آلاینده‌های فلزی، سولفات و pH بررسی شده است و مدل‌سازی انتقال آلاینده‌های فلزی، سولفات و تغییرات pH در حالت یک‌بعدی در رودخانه شور پایین‌دست معدن مس سرچشمه با در نظر گرفتن جذب خطی، جذب غیر خطی (ایزوترم لانگمویر) انجام شده است. در نهایت مدل‌سازی انتقال واکنشی آهن دوظرفیتی و تغییرات pH با در نظر گرفتن واکنش‌های اکسایش آهن دو ظرفیتی و جذب غیرخطی انجام گردید و نتایج هم به شکل مناسب در هر بخش آمده است.

## ۵-۲- مشخصات عمومی معدن مس سرچشمه

### ۵-۲-۱- موقعیت جغرافیایی و شرایط اقلیمی کانسار مس پورفیری سرچشمه

کانسار مس پورفیری سرچشمه در استان کرمان و در طول جغرافیایی ۵۵° و ۵۳° شرقی و عرض جغرافیایی ۵۸° و ۲۹° شمالی و در ارتفاع ۲۶۰۰ متری از سطح دریا واقع گردیده است (اورندی، ۱۳۸۱). این معدن در ۱۶۰ کیلومتری جنوب غربی کرمان و ۵۰ کیلومتری جنوب غرب رفسنجان و در مجموعه ارتفاعات بند ممزار- پاریز از توابع این شهرستان قرار دارد. راه‌های دسترسی به معدن از طریق جاده‌های آسفالتی کرمان-رفسنجان-شهربابک، کرمان-رفسنجان-پاریز-سیرجان می‌باشد. موقعیت جغرافیایی

کانسار مس سرچشمه در شکل (۵-۱) نشان داده شده است.



شکل (۵-۱): موقعیت شهرک سرچشمه، راه های دسترسی، موقعیت شهرک نسبت به مجتمع و معدن مس سرچشمه در تصویر ماهواره ای

معدن مس سرچشمه به علت قرار گرفتن در مناطق کوهستانی، دارای زمستان های سرد، برفگیر و بادخیز و تابستان های ملایم و معتدل می باشد. میزان ریزش جوی بین ۳۰۰ تا ۵۵۰ میلیمتر در سال گزارش شده است. این ریزش ها غالباً در فواصل زمانی آذرماه تا فروردین مشاهده می شود که یکی از پر باران ترین زیر حوضه های غرب تا جنوب غرب کرمان محسوب می گردد. درجه حرارت هوای منطقه از  $+۳۵$  درجه سانتیگراد در تابستان و  $-۲۰$  درجه سانتیگراد در زمستان متغیر است. منطقه به علت

کوهستانی بودن حدود ۳ الی ۴ ماه در سال پوشیده از برف است. بادخیزی منطقه نسبتاً شدید و بادهای متداول در زمستان در جهت جنوب، جنوب غربی و در تابستان در جهت شمال، شمال شرقی می‌وزند. سرعت باد در این ناحیه گاهی به ۱۰۰ کیلومتر در ساعت می‌رسد. شیب توپوگرافی منطقه شدید، نزولات جوی فراوان باعث فرسایش شدید و ایجاد دره‌های عمیق شده که خود بر شدت عوارض توپوگرافی می‌افزاید.

#### ۵-۲-۲- تاریخچه معدن مس سرچشمه

کانسار مس سرچشمه یکی از مهمترین کانسارهای مس و مولیبدن پورفیری روباز جهان است که بر روی کمر بند مسی قرار دارد که در اثر برخورد صفحات ایران و عربستان، همزمان با بالا آمدن محلول‌های گرم کانه‌دار ناشی از فعالیت‌های درونی زمین حدود ۲۵ میلیون سال قبل در امتداد رشته کوه زاگرس ایجاد شده است. این کانسار به صورت روباز استخراج می‌شود. منطقه کانی‌سازی شده سرچشمه، محدوده بیضی شکل با ابعاد حدود  $1300 \times 1200$  متر می‌باشد. تاریخچه این معدن به سال ۱۳۲۸ بر می‌گردد که شخصی به نام مهندس انتظام در منطقه سرچشمه به دنبال کانی‌های مس و روی بود، که متوجه وجود کانسارهای مس در این منطقه شد. در سال ۱۳۴۵ مهندس رضایی این معدن را کشف کرد و کارهای اکتشافی آن را انجام داد، ولی به علت وسعت زیاد آن به دولت واگذار شد. در سال ۱۳۴۷ قراردادی با شرکت انگلیسی سلکشن تراست<sup>۱</sup> بسته شد، که این شرکت با انجام یک سری عملیات اکتشافی از جمله حفر ۳۳۵۰۰ متر گمانه اکتشافی، ۱۷۲۰۰ متر تونل اکتشافی و تهیه نقشه‌های متعدد، ذخیره‌ای معادل ۴۰۰ میلیون تن سنگ معدن با عیار ۱/۱۲٪ مس را تعیین نمود. بعد از آن در سال ۱۳۵۱

<sup>۱</sup> Selection trust

قراردادی با شرکت آمریکایی آناکاندا<sup>۱</sup> بسته شد، این شرکت کارهای اکتشافی را کامل کرد و در حدود ۳۳ هزار متر حفاری در منطقه انجام داد و سه عدد چاه ۱۰۰۰ متری نیز در منطقه حفر کرد و با حفر ۸۹۰۰ گمانه اکتشافی و تهیه نقشه های اکتشافی با مقیاس های مختلف ذخیره ای معادل ۸۰۰ میلیون تن با عیار ۰/۸۴٪ را تعیین کردند.

پس از پیروزی انقلاب اسلامی، کارهای اکتشافی و زمین شناسی که از جمله آن، تهیه نقشه ها، مقاطع عمودی و افقی زمین شناسی، تعیین عیار مس و مولیبدن برای هر پله می باشد، توسط کارشناسان ایرانی صورت پذیرفت. آخرین اطلاعات و آمار داده شده توسط این کارشناسان درباره ذخیره معدن به صورت جدول (۵-۱) است (گزارشات زمین شناسی معدن مس سرچشمه، ۱۳۸۵):

جدول (۵-۱): میزان ذخیره و عیار متوسط در معدن سرچشمه

ذخیره کل (تن)	عیار متوسط (٪)	فلز
۱،۲۲۴،۳۲۷،۰۷۹	۰/۶۹	Cu
۸۱۲،۵۲۷،۲۰۰	۰/۲۷	Mo

معدن مس سرچشمه بیضی شکل است و کانسار مس سرچشمه در قسمت مرکزی سلسله کوه های زاگرس قرار گرفته و متشکل از سنگ های چین خورده، گسله، سنگ های رسوبی و مواد آتشفشانی اوایل دوران سوم می باشد. سنگ سرچشمه پورفیری با گرانودیوریت مربوط به میوسن یا الیگومیوسن مرتبط می باشد و همچنین نسل های مربوط به ائوسن میانی در طبقه نازک آهکی، در نزدیکی توده آذرین پیدا شده است.

<sup>۱</sup> Anaconda

### ۵-۳- واحدهای مختلف تولیدی مجتمع مس سرچشمه

#### ۵-۳-۱- واحد معدن

روش بهره برداری در معدن بدین گونه است که پس از انفجار به وسیله بیل های الکتریکی، کامیون های وابکو بارگیری شده و بر حسب نوع سنگ به انبار سنگ های باطله یا انبار اکسید و یا به سنگ شکن اولیه حمل می گردد. بر اساس طرح معدن، روزانه می باید حدود ۴۳۳۶۰ تن سنگ معدن، با عیار متوسط ۱/۲ درصد به سنگ شکن اولیه حمل شود و به طور متوسط همین مقدار نیز باید سنگ باطله جابجا شود تا دسترسی به سنگ سولفور امکان پذیر باشد.

#### ۵-۳-۲- واحد پرعیار کنی (تغلیظ)

تجهیزات اصلی این واحد عبارتند از: واحد سنگ شکن ها، پرعیار کنی، فیلتر و خشک کن، کارخانه آهک، کارخانه مولیبدن، واحد ته نشین کننده باطله و سد رسوبگیر.

سنگ حمل شده توسط کامیون های معدن از سه جهت به داخل سنگ شکن اولیه کله قندی با قدرت ۶۶۰ اسب بخار تخلیه می شود. عملکرد این بخش به نحوی است که سنگ معدن ارسالی را به قطر حداکثر ۲۰ سانتی متر رسانده و سپس به وسیله سنگ شکن های مخروطی مرحله دوم و مرحله سوم حدود ۸۰ درصد سنگ سولفیدی تا قطر حداکثر ۱۳ میلیمتر خرد شده و تحویل انبار می گردد. سپس سنگ معدن خرد شده توسط نوار نقاله از انبار خاک به داخل آسیاب ها هدایت می شود. تعداد ۸ آسیاب در دو بخش چهارتایی، هر کدام به قطر ۵/۰۳ متر و طول ۸/۲۳ متر به طور موازی کار می کنند. جهت انجام عملیات دانه بندی، هر کدام از آسیاب ها به ۱۰ سیلکون به صورت سیکل بسته متصل شده اند. سرریز سیکلون ها به شکل دوغاب به سلول

های شناورسازی تحویل داده می‌شود. حاصل این کارخانه روزانه ۱۴۳۲ تن کنسانتره مس و مولیبدن با عیار ۳۲/۱۷٪ مس و ۳۹۷۳۳ تن باطله با عیار ۱/۷٪ مس می‌باشد که اولی جهت جدایش و بازیابی مولیبدن به کارخانه مولیبدن و دومی جهت آگیری به تهنشین‌کننده‌های باطله هدایت می‌شود (بنی اسدی، ۱۳۸۶).

### ۵-۳-۳- واحد ذوب

تجهیزات اصلی این کارخانه شامل انبار، سیستم آماده‌سازی خوراک کوره‌های انعکاسی و دیگ‌های بخار، کوره‌های آند، چرخ ریخته‌گری و کوره‌های نگهدارنده می‌باشد. کنسانتره مس پس از خشک شدن در کوره خشک‌کن، با رطوبت باقیمانده ۷٪ ذخیره می‌شود و سپس به واحد ذوب انتقال داده می‌شود. قبل از حمل آن به واحد ذوب با کمک ذوب مخلوط می‌شود. کمک ذوب‌ها موادی از قبیل آهک و سیلیس هستند که جهت تولید سرباره و جداکردن ناخالصی‌ها به خوراک کوره‌های انعکاسی و کوره‌های مبدل اضافه می‌شوند.

### ۵-۳-۴- واحد پالایشگاه

ظرفیت تولید پالایشگاه با روش عادی ۱۷۱۰۰۰ تن در سال و با روش P.R.C معادل ۲۴۰۰۰۰ تن در سال می‌باشد. کل بخش الکترولیز، شامل ۹۶۰ سلول الکترولیز بوده و دارای تجهیزات تخلیه و تولید سولفات نیکل و کارخانه شستشوی اسیدی می‌باشد. قسمت‌های مهم پالایشگاه عبارتند از: بخش الکترولیز و کارگاه ریخته‌گری (گزارشات زمین‌شناسی معدن مس سرچشمه، ۱۳۸۵).

#### ۵-۴- زمین شناسی عمومی ناحیه معدن مس سرچشمه

معدن مس سرچشمه در نزدیکی مرکز کمربند کوهزایی با کشیدگی شمال-شمال غرب و جنوب - جنوب شرق، قرار دارد که عمدتاً کمپلکس گسله شده و چین خورده از نوع آتشفشانی - رسوبی (اوایل دوره ترشیاری) می باشد. این کانسار به طور تناوبی از ترکیه تا بلوچستان در قسمت جنوبی ایران گسترش پیدا کرده است (شفیعی، ۱۳۷۹). معدن مس سرچشمه از لحاظ زمین شناسی ناحیه ای، در بخش مرکزی و شمالی ارتفاعات بند مزار - پاریز قرار گرفته است که این منطقه خود بخش میانی کمربند ولکانو-پلوتونی دهج- ساردوئیه را تشکیل می دهد. در محدوده معدن واحدهای سنگی متفاوتی از لحاظ ترکیبی و سنی رخنمون دارند و محدوده سن پالئوژن تا عهد حاضر را شامل می شوند. قدیمی ترین واحدهای سنگی محدوده معدن، سنگ های آتشفشانی ائوسن عمدتاً با ترکیب آندزیتی می باشند که همراهی آنها با رسوبات این دوره نشان دهنده یک محیط آتشفشانی- رسوبی زیر دریایی در آن زمان می باشد. بعد از واحد مذکور، یک فاز نفوذی کوارتز دیوریتی به سن رادیو ایزوتوپ ۲۹ میلیون سال در دو کیلومتری شمال غرب محدوده کانسار در سنگ های آتشفشانی - رسوبی ائوسن نفوذ و باعث چین خوردگی و گسله دار شدن این ناحیه گردیده است. فاز اصلی نفوذی و مولد کانی سازی در منطقه سرچشمه با نام محلی استوک پورفیری سرچشمه با ترکیب گرانودیوریت به سن رادیو ایزوتوپ ۱۲/۵ میلیون سال می باشد که با نفوذ در مرکز منطقه و سنگ های آتشفشانی ائوسن، محدوده ای به وسعت حدود ۲ کیلومتر مربع را ضمن دگرسانی، کانی سازی نموده است و در این زمان است که کانسار مس پورفیری سرچشمه شکل می گیرد. اندکی بعد از جایگیری، تبلور و آزاد شدن محلول های گرمابی کانه دار در سنگ های آتشفشانی دیواره ای، در مراحل میانی، نهایی و بعد از کانی سازی، به ترتیب توده نفوذی کوچکی به نام پورفیری دانه ریز تأخیری و دایک هایی با روند عمومی شمال-شمال غرب و جنوب- جنوب شرق، با نام های هورنبلند پورفیری پیشین با دگرسانی و اندکی کانی سازی و نهایتاً دایک های هورنبلند پورفیری پسین، فلدسپار پورفیری و

بیوتیت پورفیری و غیرمینرالیزه به سن ۳-۴ میلیون سال در سنگ‌های قدیمی‌تر منطقه از جمله سنگ‌های آتشفشانی ائوسن و استوک پورفیری سرچشمه به سن میوسن میانی نفوذ کرده‌اند و در مواردی باعث جابجایی، شکستگی و قطع شدن کانی‌زائی در این سنگ‌ها گردیده‌اند. بعد از نفوذ آخرین دایک بنام بیوتیت پورفیری، جدیدترین واحدهای سنگی منطقه آتشفشان جوان امیرالمؤمنین با سن ۰/۵ - ۱/۵ میلیون سال است (شفیعی، ۱۳۷۹)، که متشکل از توف، ایگنمبریت و برش با ترکیب داسیتی می‌باشد و در شمال معدن رخنمون دارد. این واحد، روی تشکیلات قبلی را پوشانده است. بطور کلی تاریخچه تکوین و کانی‌سازی ناحیه سرچشمه را می‌توان به صورت زیر بیان کرد:

- نهشته شدن توالی ضخیم از سنگ‌های آتشفشانی - رسوبی در طول دوره ائوسن در منطقه پاریز - بند مزار.

- نفوذ و جایگزینی یک توده کوارتز دیوریتی به سن ائوسن فوقانی - الیگوسن در سنگ‌های آتشفشانی ائوسن در دو کیلومتری شمال غرب کانسار و چین خوردگی سنگ‌های ولکانیکی.

- نفوذ و جایگیری استوک پورفیری سرچشمه به سن میوسن میانی داخل سنگ‌های آتشفشانی ائوسن در مرکز منطقه، این فاز نفوذی منشاء کانسارسازی سرچشمه می‌باشد.

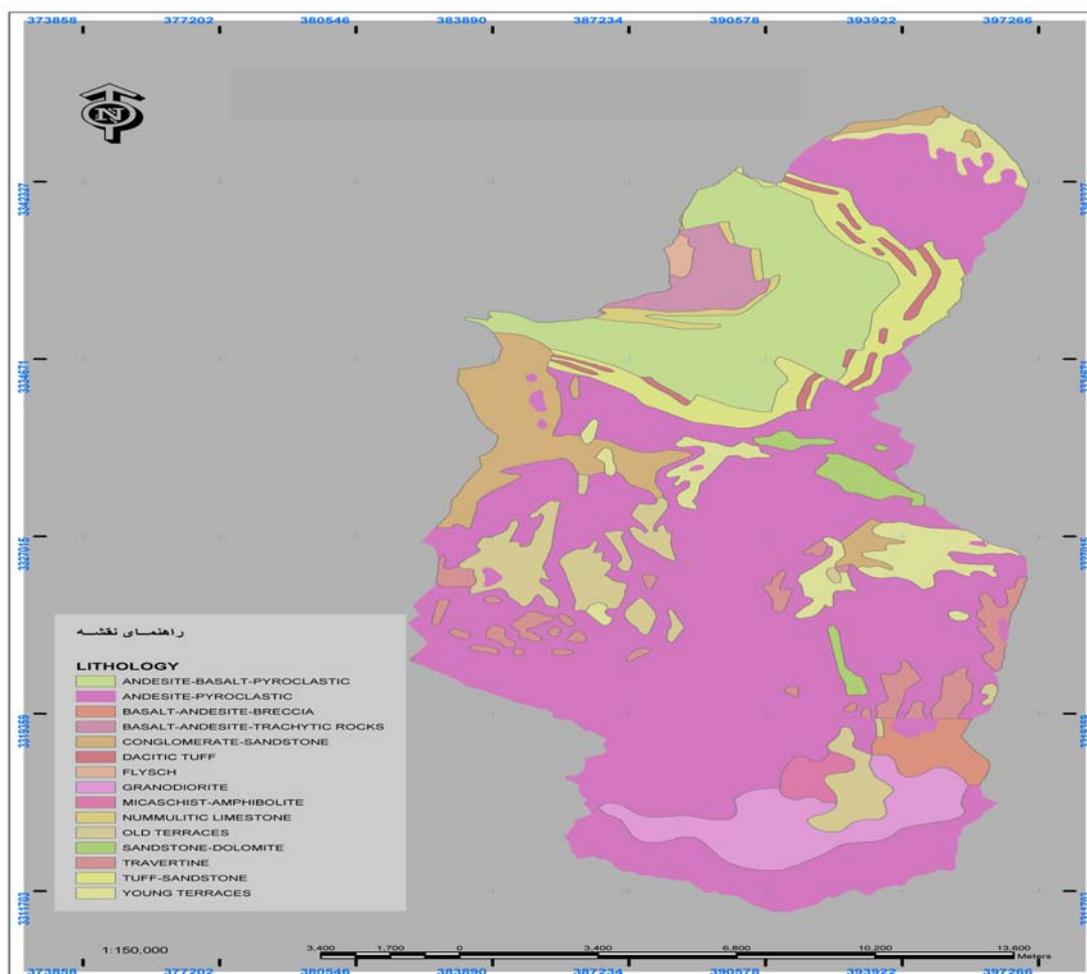
- ایجاد درزه و شکستگی فراوان در سنگ‌های آتشفشانی دیواره و خود استوک در نتیجه آزاد شدن محلول‌های گرمایی فلزدار حاصل از تبلور و جایگزینی استوک و در نتیجه دگرسانی و کانی‌زائی به وسعت حدود ۲ کیلومتر مربع در منطقه و تشکیل کانی‌سازی تیپ پور فیری.

- نفوذ یک توده کوچک به نام پورفیری دانه‌ریز تأخیری در مراحل میانی کانی‌زایی و همچنین تزریق یک سری دایک‌های همزمان و همچنین در مراحل نهایی و بعد از کانی‌زائی با روند شمال - شمال غرب،

جنوب- جنوب شرق در سنگ های آتشفشانی ائوسن و استوک پور فیری سرچشمه.

- فرسایش و ظاهر شدن مجموعه کانی سازی مس پورفیری، اکسیداسیون و شستشوی سولفیدها در نزدیکی سطح زمین و نهایتاً شکل گیری ساختار منطقه ای (زونالیته) شاخص سیستم های مس پورفیری.

- فوران های آتشفشانی جوان به سن پلیستوسن تحت نام کوه امیرالمومنین شامل آگلومرا، توف، ایگنیمبریت با ترکیب داسیتی در چهار کیلومتری شمال کنسار و پوشیده شدن واحدهای قدیمی تر منطقه توسط این ولکانیک ها. نقشه زمین شناسی حوزه سرچشمه در شکل (۵-۲) نشان داده شده است.



شکل (۵-۲): نقشه زمین شناسی حوزه سرچشمه

## ۵-۵- کانی سازی در معدن مس سرچشمه

برای معادن مس پورفیری مدلی را در نظر گرفته اند که این مدل برای معدن مس سرچشمه نیز صادق است. به این صورت که در این معادن از سطح زمین به سمت عمق منطقه بندی به صورت زیر مشاهده می شود.

- منطقه شسته شده<sup>۱</sup>،

- منطقه اکسید شده<sup>۲</sup>،

- منطقه سوپرژن یا غنی شده<sup>۳</sup>،

- منطقه هیپوژن<sup>۴</sup>.

### ۵-۵-۱- منطقه شسته شده

منطقه شسته شده در بالاترین بخش قرار دارد. کانی های آن شامل گوسان (کلاهدک آهنی) که رنگ آن قهوه ای سوخته متمایل به سیاه می باشد، که به آن گوتیت نیز می گویند که این خود یک نشانه برای اکتشاف ذخایر پورفیری به شمار می رود. کانی های بعدی این زون شامل: لیمونیت (زرد رنگ)، هماتیت (قرمز رنگ) و دیگر اکسیدهای آهن می باشند.

<sup>1</sup> Leach

<sup>2</sup> Oxide zone

<sup>3</sup> Supergene zone

<sup>4</sup> Hypogene zone

**۵-۵-۲- منطقه اکسیدشده**

ضخامت متوسط این منطقه ۲۶ متر است. کانی‌های تشکیل دهنده آن شامل کربنات‌های مس مانند مالاکیت (سبزرنگ)، آزوریت (آبی رنگ) و اکسیدهای مس شامل کوپریت و تنوریت می‌باشد. در این منطقه سنگ‌های میزبان بر اثر عوامل فیزیکی و شیمیایی، فرسایش و دگرسانی متفاوتی را نشان می‌دهند. ضخامت این منطقه بر حسب توپوگرافی کانسار و سطح آب‌های زیرزمینی در نقاط مختلف کانسار به شدت متفاوت است، بطوری که در بخش مرکزی کانسار، از ۸ تا ۴۰ متر و در نقاط مرتفع بیش از ۱۰۰ متر می‌باشد (شهاب پور، ۱۳۷۶).

**۵-۵-۳- منطقه سوپرژن (غنی شده)**

ضخامت متوسط این منطقه ۳۷ متر است. کالکوسیت و کوولیت کانی‌های تشکیل دهنده این منطقه می‌باشند، که جزء کانی‌های ثانویه مس هستند (شفیعی، ۱۳۷۹). منطقه سوپرژن در اثر شسته‌شدن کانی‌های اولیه در افق‌های بالاتر توسط آب‌های سطحی یا برف و باران و ذخیره شدن در افق خاص به وجود می‌آید. در این معدن آب‌های زیرزمینی باعث انباشته شدن کانی‌های مس‌دار از نوع ثانویه مانند کالکوسیت و کوولیت شده است.

**۵-۵-۴- منطقه هیپوژن**

این منطقه تا عمق نهایی معدن ادامه دارد. کانی‌های اصلی آن شامل کالکوپریت و بورنیت است. بورنیت حالت قوس و قزح دارد. ضخامت این منطقه بطور کامل مشخص نیست. این منطقه در زیر منطقه سوپرژن واقع شده است. حفاری‌های عمیق (گمانه‌هایی بطول ۶۰۰ الی ۱۰۰۰ متر) از ادامه داشتن این

منطقه در اعماق خبر می‌دهند. تناژ این منطقه از دو ناحیه قبلی بیشتر است. کانی اصلی در این منطقه، کالکوپیریت است و کانی‌های مولیبدنیت، مقدار کمی آنارژیت و رگه‌های گالن و اسفالریت نیز در این منطقه یافت می‌شود. با افزایش عمق، عیار مس کاهش می‌یابد. تغییرات عیار مولیبدن در این ناحیه بر عکس عیار مس با افزایش عمق، بیشتر می‌شود.

در معادن مس پورفیری کانی پیریت در همه مناطق مشاهده می‌شود. دور تا دور معدن مس سرچشمه را یک هاله پیریتی با عیار آهن ۵ درصد در بر گرفته است، که به سمت داخل عیار آن کم و به سمت خارج عیارش زیاد می‌شود (گزارشات زمین‌شناسی معدن مس سرچشمه، ۱۳۸۵).

#### ۵-۶- مطالعات زیست‌محیطی مربوط به منطقه

در این تحقیق با انجام آزمایش بر روی نمونه‌های آب رودخانه شور در نقاط مختلف، اثرات زیست‌محیطی ناشی از ورود زهاب اسیدی منشأ گرفته از معدن مس سرچشمه به رودخانه مورد بررسی و مدل‌سازی ریاضی قرار گرفته است. زهاب اسیدی که حاوی غلظت‌های بالایی از فلزات سنگین می‌باشد به داخل رودخانه شور وارد شده و باعث آلودگی محیط زیست رودخانه شده است. بنابراین ضرورت دارد که آلودگی ناشی از ورود زهاب اسیدی در محدوده معدن مس سرچشمه مورد مدل‌سازی قرار گیرد و در نهایت راه‌کارهای مدیریتی صحیحی جهت کنترل این محلول‌های حاوی فلزات سنگین صورت گیرد.

#### ۵-۷- روش تحقیق، مواد و نتایج آنالیز نمونه‌ها

در این تحقیق از نتایج آنالیز نمونه‌های آب متأثر از زهاب اسیدی (بنی اسدی، ۱۳۸۶) برای کالیبراسیون مدل عددی استفاده شده است. نمونه‌برداری از آب، نیاز به آگاهی کامل از اصول نمونه

برداری، آماده سازی و نگهداری آب دارد تا بتوان با استفاده از نتایج حاصل از آنالیز داده ها از اثرات منفی ورود مواد اسیدی و آلاینده ها به محیط زیست آگاه شد. بدین منظور با رعایت اصول و نکات نمونه برداری از آب سعی در نمونه برداری دقیق از آبها صورت گرفته است. در این تحقیق، هفت ایستگاه جهت نمونه برداری و آنالیز نمونه های آب در رودخانه شور معدن مس سرچشمه در نظر گرفته شده که موقعیت و مختصات جغرافیایی آنها در جدول (۲-۵) ذکر گردیده است. نمونه برداری به صورت دستی و در داخل ظروف پلاستیکی پلی اتیلنی با حجم ۱۰۰۰-۵۰۰ میلی لیتر صورت گرفته است. نمونه های آب گرفته شده شامل محلول ناشی از نشت اسید، محلول ناشی از سرریز کارخانه لیچینگ به داخل رودخانه شور و آب رودخانه شور در نقاط مختلف می باشند.

جدول (۲-۵): محل و موقعیت جغرافیایی ایستگاه های نمونه برداری آب (بنی اسدی، ۱۳۸۶)

شماره ایستگاه	نام ایستگاه	علامت اختصاری	X (متر)	Y (متر)
۱	سرریز کارخانه لیچینگ	S <sub>۱</sub>	۳۸۹۸۰۹	۳۳۱۵۷۹۲
۲	آب رودخانه (پایین دست کارخانه لیچینگ)	S <sub>۲</sub>	۳۸۹۷۳۷	۳۳۱۵۷۳۴
۳	محلول نشتی هیپ شماره ۲ به داخل رودخانه	S <sub>۳</sub>	۳۹۰۲۳۴	۳۳۱۵۰۹۵
۵	ترکیب محلول نشتی و آب رودخانه	S <sub>۵</sub>	۳۹۰۰۱۳	۳۳۱۵۴۲۲
۶	آب رودخانه (پایین دست سنگ شکن)	S <sub>۶</sub>	۳۹۰۰۱۳	۳۳۱۵۴۲۲
۷	آب رودخانه (بالادست سنگ شکن)	S <sub>۷</sub>	۳۳۹۷۶۵	۳۳۱۴۵۷۸

برای جلوگیری از تغییر مقادیر پارامترها عمل تثبیت بلافاصله پس از برداشت، با اضافه کردن اسید نیتریک به یکسری از بطری ها به ازای ۱۰۰۰ cc، ۱۰ cc اسید برای نگهداری آبها تا زمان آنالیز بر روی نمونه ها انجام شده است (Xavier, 1990). پس از آماده سازی، نمونه ها جهت آنالیز به آزمایشگاه مرکزی

مجتمع مس سرچشمه فرستاده شده و مقدار کل عناصر Cu و Mn ،Fe ،Mo ،Cr ،Ni ،Co ،Cd ،Zn ،Pb در هر یک از نمونه ها توسط دستگاه جذب اتمی اندازه گیری شده است.

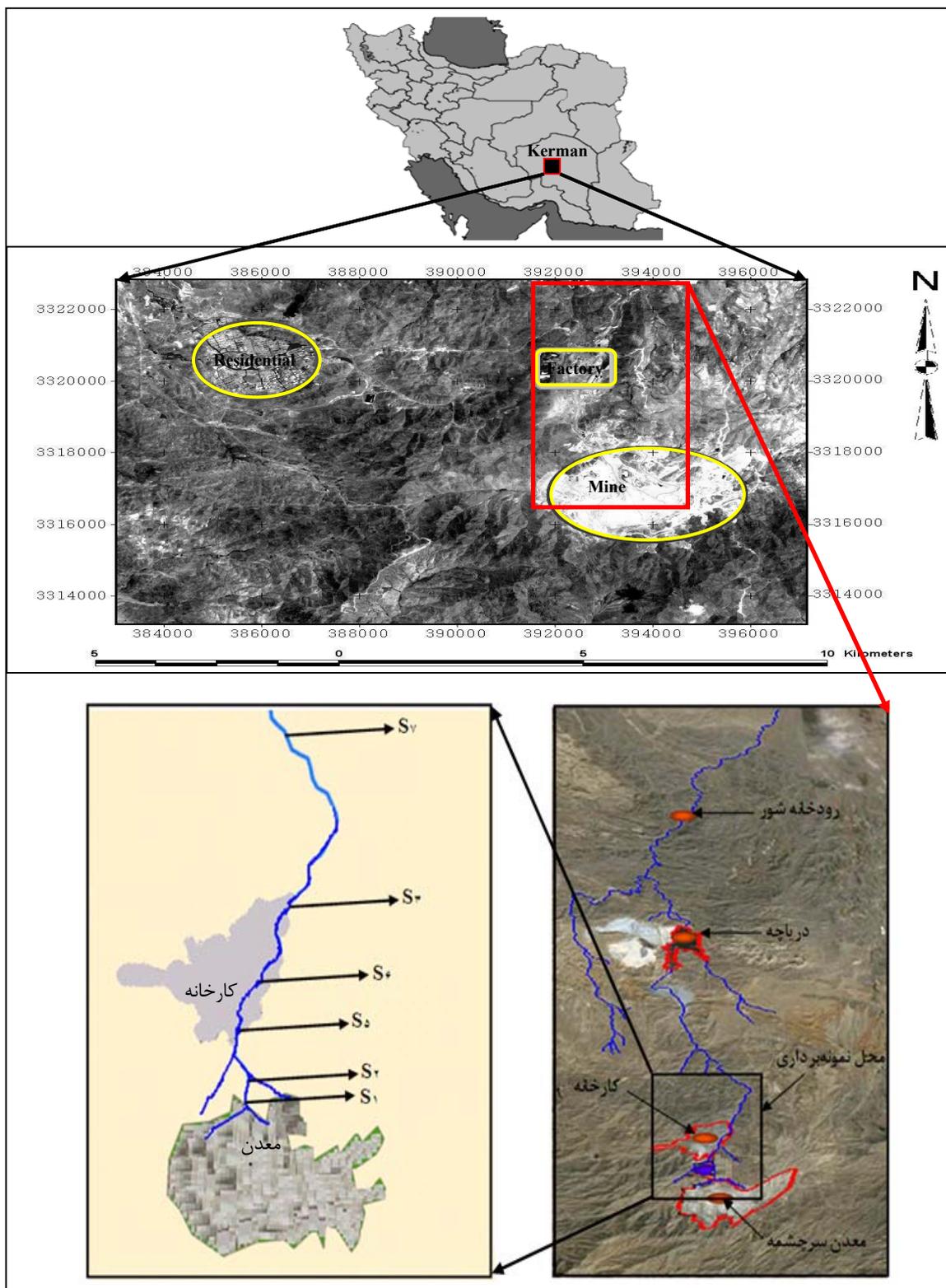
دستگاه های مورد استفاده برای نمونه برداری، آماده سازی و آنالیز نمونه ها عبارتند از: دستگاه جذب اتمی، ICP، آون، اتوکلاو، ترازو و نمونه گیر. در این مطالعه، جهت آنالیز فلزات سنگین در محدوده ppm از روش جذب اتمی شعله ای و در محدوده ppb از روش ICP استفاده شده است. جهت ثبت موقعیت مکانی محل های نمونه برداری توسط دستگاه GPS انجام شده است. پارامترهای صحرایی نظیر pH (خاصیت اسیدی آب) نیز بلافاصله بعد از نمونه برداری توسط دستگاه اندازه گیری و ثبت شد. نتایج آنالیز نمونه ها در جدول (۳-۵) آورده شده است.

جدول (۳-۵): نتایج آنالیز نمونه ها برای فلزات سنگین، سولفات و pH (بنی اسدی، ۱۳۸۶)

نمونه ها	فاصله (متر)	Cu	Mn	Fe	Cd	Pb	Cr	Mo	Zn	pH	SO <sub>4</sub>
S <sub>۱</sub>	۰	۴۱۰	۱۰۵۰	۴۸۰۰	۳/۸	۱/۸	۱/۳	۰/۶	۴۷۵	۲	۳۵۰۰
S <sub>۲</sub>	۶۹/۹	۲۱۵	۳۶۰	۱۵۱۵	۱/۷	۱	۰/۷	۰/۳	۱۸۵	۲/۳	۳۴۰۰
S <sub>۵</sub>	۳۵۷	۲۲۵	۶۲/۵	۲/۱	۰/۱۷	۰/۲۲	۰/۰۷	۰/۱	۲۵	۳/۹	۳۳۰۰
S <sub>۶</sub>	۴۱۴	۳۲	۵/۵	۰/۵	۰/۰۲	۰/۱۸	۰/۰۵	۰/۰۱	۱/۵۱	۴/۳	۱۰۲۳
S <sub>۳</sub>	۶۹۶	۵۷۰	۲۱۵	۳۸	۰/۴۵	۰/۴	۰/۲	۰/۱	۶۷	۳/۴	۳۰۰۰
S <sub>۷</sub>	۱۲۰۰	۸۳	۴/۲	۰/۱۲	۰/۰۱	۰/۱	۰/۰۵	۰/۰۱	۱/۱۳	۴/۳	۶۲۴

### ۵-۸- مکان های نمونه برداری

در شکل (۳-۵) مکان های نمونه برداری در رودخانه شور مشخص گردیده است.



شکل (۵-۳): محل های نمونه برداری و موقعیت معدن سرچشمه (اصلاح شده از Doulati Ardejani et al., 2008 a)

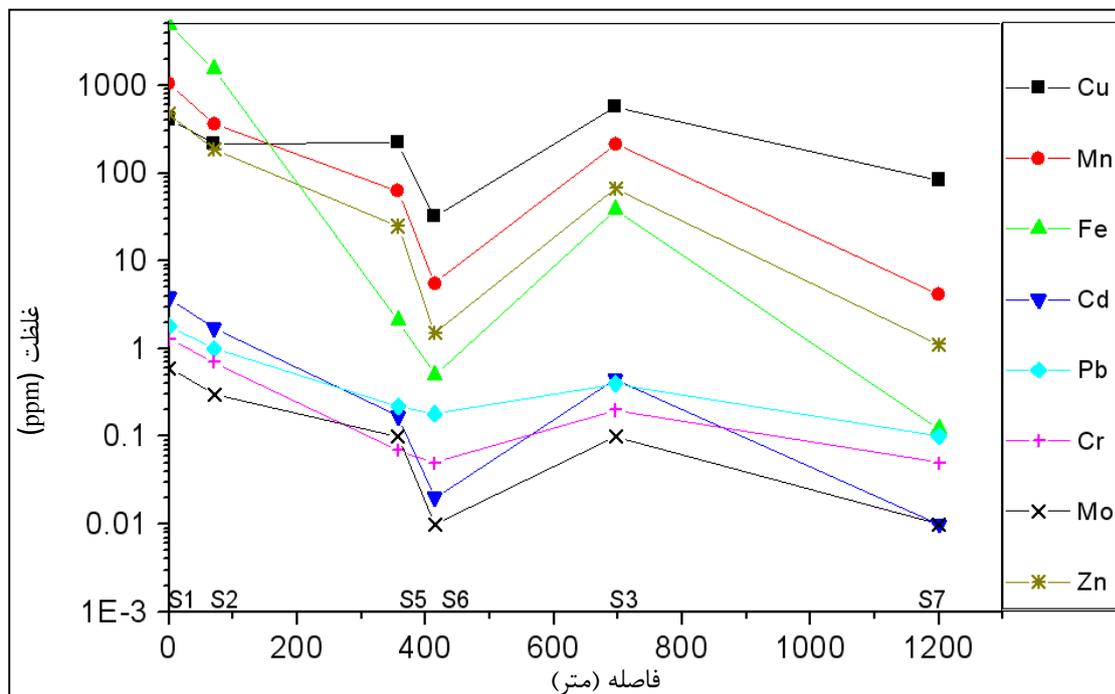
تعداد ۶ نمونه از رودخانه شور برای کالیبره کردن مدل در نظر گرفته شده است. نتایج آنالیز مربوط به یون های فلزی مس، منگنز، آهن، کادمیم، سرب، کرم، مولیبدون، روی و غلظت سولفات و مقدار اسیدیته یا pH در ایستگاه های مختلف در رودخانه شور جهت مدل سازی انتخاب شده است.

نمونه برداری از سرریز کارخانه لیچینگ، آب رودخانه (پایین دست کارخانه لیچینگ)، محلول نشتی هیپ به داخل رودخانه، آب رودخانه (بالادست کارخانه لیچینگ)، ترکیب محلول نشتی و آب رودخانه شور، آب رودخانه (پایین دست سنگ شکن) و آب رودخانه شور (بالادست سنگ شکن) صورت گرفته است.

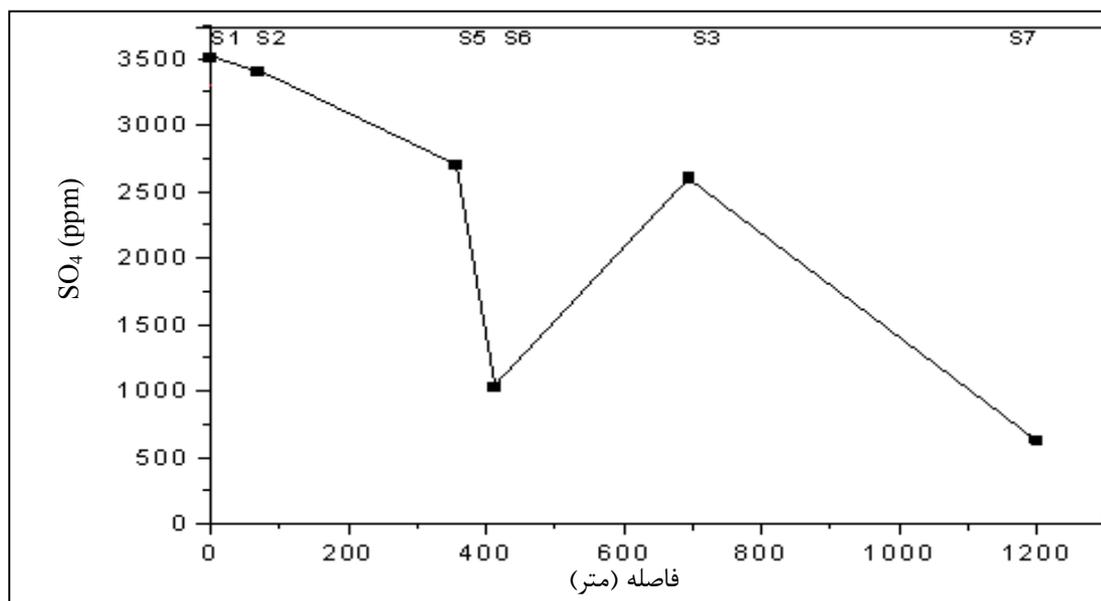
## ۵-۹- بررسی روند تغییرات فلزات سنگین، سولفات و اسیدیته از بالادست به

### پایین دست رودخانه شور

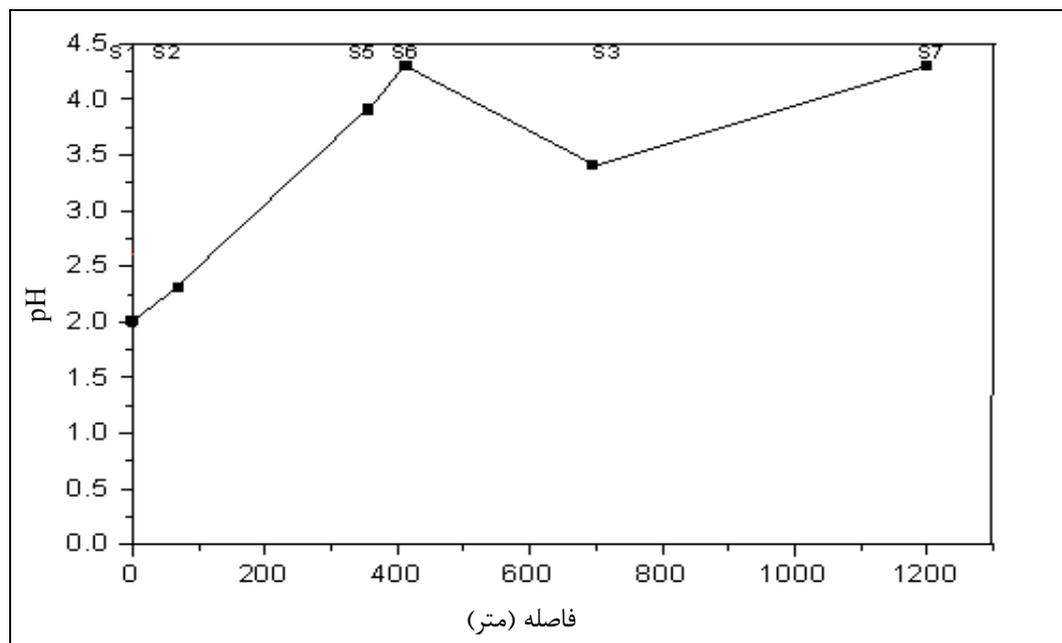
در این بخش روند تغییرات یون های فلزی مس، منگنز، آهن، کادمیم، سرب، کرم، مولیبدون و روی، سولفات و اسیدیته آب رودخانه مورد بررسی قرار گرفته است. همانطور که شکل های (۵-۴) تا (۵-۶) دیده می شود، غلظت فلزات مس، منگنز، آهن، کادمیم، سرب، کرم، مولیبدون و روی از بالادست به سمت پایین رودخانه به علت اختلاط با آب های غیرآلوده و جذب فلزات مذکور کاهش می یابد. روند تغییر سولفات هم درست مانند یون های فلزی است. روند تغییر pH عکس روند تغییرات فلزات است، یعنی از بالادست به سمت پایین رودخانه مقدار pH افزایش می یابد و این مسئله به این معناست که اسیدیته یا غلظت یون  $H^+$  در اثر اختلاط با آب های غیرآلوده پایین دست رودخانه کاهش می یابد.



شکل (۴-۵): روند تغییرات غلظت یون‌های فلزی از بالادست به سمت پایین دست رودخانه شور



شکل (۵-۵): روند تغییرات غلظت سولفات از بالادست به سمت پایین دست رودخانه شور



شکل (۵-۶): روند تغییرات pH از بالادست به سمت پایین دست رودخانه شور

## ۵-۱۰- مدل سازی انتقال فلزات سنگین، سولفات و اسیدیت در رودخانه شور

### ۵-۱۰-۱- مدل سازی انتقال و فرآیند جذب

جذب سطحی را می‌توان جذب مولکول‌ها توسط سطوح داخلی و خارجی جامدات یا سطح مایعات تعریف کرد. جذب بر روی این سطوح به علت نیروهای جذب کننده اتم‌ها و مولکول‌هایی که سطوح را ساخته‌اند اتفاق می‌افتد. زمانی که ناخالصی‌ها از یک فاز مایع بر روی یک سطح جامد جذب می‌شوند، فرآیند جذب سطحی در تماس دو فاز جامد-مایع اتفاق می‌افتد و پدیده‌هایی که در این تقابل روی می‌دهد سرعت جذب و میزان جذب را تعیین می‌کند. مکانیسم‌های تبدیل جرم به دو گروه زیر تقسیم می‌شوند:

- فرآیندهای غیر بیولوژیکی

## - فرآیندهای بیولوژیکی

فرآیندهای غیربیولوژیکی به طور مستقل و بدون دخالت فعالیت میکرواورگانیسمها صورت می پذیرد.

فرآیندهای بیولوژیکی آن دسته از فرآیندهایی را شامل می شود که در آنها میکرواورگانیسمها از جمله باکتری ها جرم ماده شیمیایی را مصرف می کنند. عمده ترین واکنش های غیر بیولوژیکی عبارتند از: تشکیل کمپلکس، ترسیب و انحلال، تخریب رادیواکتیوی و جذب. در سیستم جریان آب های سطحی و زیرزمینی پدیده جذب یک فرآیند مهم در رقیق سازی آلاینده ها ضمن انتقال آنها در محیط به حساب می آید. پدیده جذب یک فرآیند تبدیل فاز برای انتقال ماده آلاینده از فاز مایع به فاز جامد می باشد.

بسیاری از فلزات سنگین بلافاصله جذب سطوح جامدات شده و یا در اثر فرآیند تبادل یونی توسط کانی های رسی محصور شده و از فاز محلول خارج می شوند (Doulati Ardejani, 2003). عوامل زیر بر پدیده جذب مؤثر هستند:

- مشخصات آلاینده ها و سیال در برگیرنده شامل pH و قابلیت حل شوندگی آلاینده در آب.

- خصوصیات جامدات و محیطی که آلاینده ها در آن جذب می شوند.

جذب سطحی یک ترکیب بر روی جاذب را می توان با استفاده از روابط ریاضی که اصطلاحاً ایزوترم جذب نامیده می شوند، شرح داد. مقدار ماده جذب شونده که می تواند بر روی یک جاذب بخصوص جذب گردد، تابع غلظت ماده جذب شونده و دما می باشد. ایزوترمها مقیاسی از ظرفیت یک جاذب به عنوان تابعی از غلظت ماده جذب شونده در زهاب هستند. روش اندازه گیری ظرفیت و عمر یک جاذب، در نظر گرفتن ایزوترمهای جذب می باشد (Doulati Ardejani, 2003). در عمومی ترین حالت، غلظت تعادلی یک جاذب حل شونده را می توان به صورت رابطه (۵-۱) بیان کرد (Sheng and Smith, 1997):

$$Q^* = f(C_0, T) \quad (1-5)$$

که در آن:

$Q^*$  = غلظت تعادلی،

$C_0$  = غلظت ورودی،

$T$  = دمای جذب شونده در زمان عبور جریان است.

### ۵-۱۰-۲- مدل‌سازی انتقال آلاینده‌های فلزی، سولفات و تغییرات pH در حالت یک بعدی

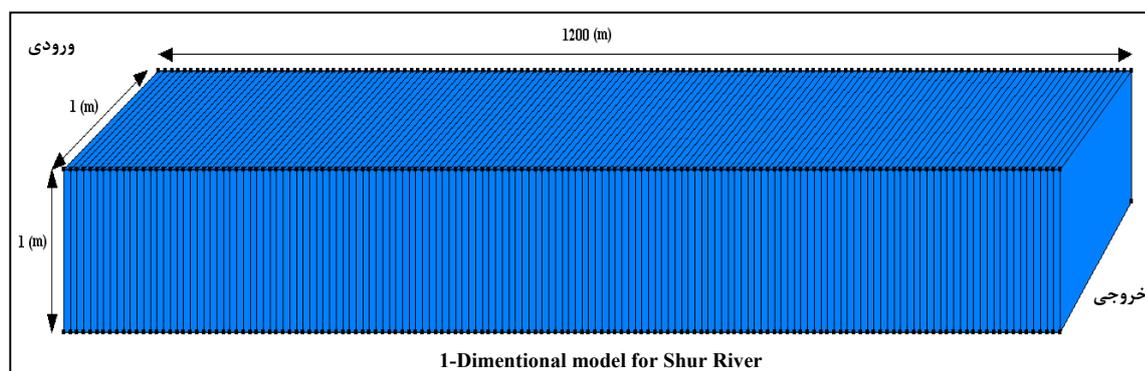
در رودخانه شور، پایین دست معدن مس سرچشمه، با در نظر گرفتن فرآیند جذب خطی

مدل یک بعدی به طول ۱۲۰۰ متر، پهنا ۱ متر و عمق ۱ متر به صورت شکل (۵-۷) در نظر

گرفته شده است. مدل به صورت یک شبکه مستطیلی متشکل از ۱۵۰۰ مش در محیط نرم افزار ساخته

شد. سرعت جریان آب در رودخانه ۱ متر بر ثانیه فرض شده و مدل‌سازی در مدت زمان ۱۲۰۰ ثانیه انجام

گردید.



شکل (۵-۷): مدل مفهومی مربوط به محدوده پخش آلودگی و مش‌بندی مناسب برای رودخانه در حالت یک بعدی

فرآیندهایی که ممکن است در انتقال، توزیع و پخش آلاینده ها مؤثر باشند عبارتند از:

- پهنرفت،

- پراکندگی هیدرودینامیکی.

مؤلفه سرعت جریان آب در رودخانه که سبب انتقال آلاینده های فلزی و سولفات می گردد پهنرفت می باشد. پراکندگی هیدرودینامیکی به مجموع دو مؤلفه پراکندگی و نفوذ اطلاق می شود. در این مدل سازی مؤلفه نفوذ عملاً نسبت به دو مؤلفه پهنرفت و پراکندگی تأثیرش ناچیز است. ضریب نفوذ برابر  $1 \times 10^{-9}$  متر مربع بر ثانیه در نظر گرفته شده، ضریب پراکندگی  $1/5$  متر و در نتیجه با در نظر گرفتن سرعت  $1$  متر بر ثانیه مقدار مؤلفه پراکندگی هیدرودینامیکی برابر  $1/5$  متر مربع بر ثانیه در نظر گرفته شده است.

معادله حاکم بر انتقال آلاینده در حالتی که جذب خطی در نظر گرفته می شود، به صورت (۲-۵)

بیان می گردد.

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2-5)$$

که در آن:

$D_x$  = پراکندگی هیدرودینامیکی بر حسب متر مربع بر ثانیه،

$u_x$  = سرعت جریان آب بر حسب متر بر ثانیه،

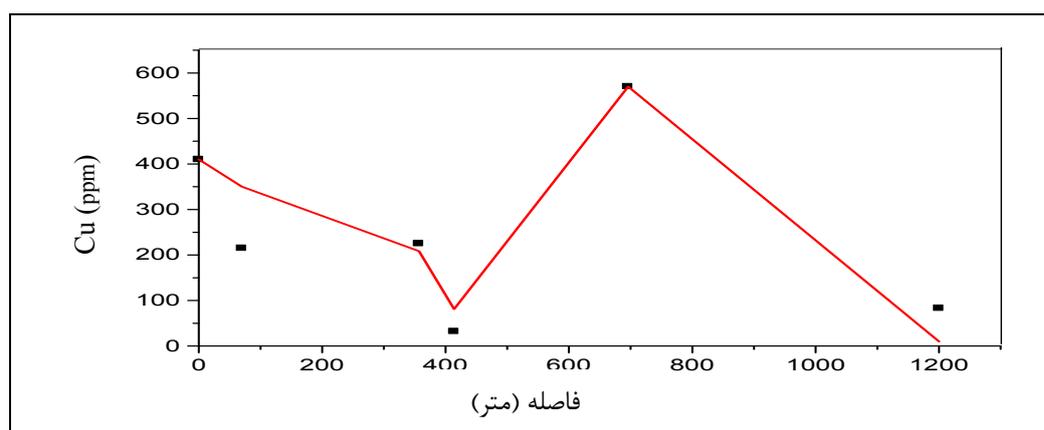
و  $x$ ،  $t$  و  $R$  به ترتیب فاصله (متر)، زمان (ثانیه) و عامل تأخیر می باشند.

همانطور که قبلاً گفته شد جذب خطی با در نظر گرفتن یک فاکتور تأخیر اعمال می شود. فاکتور

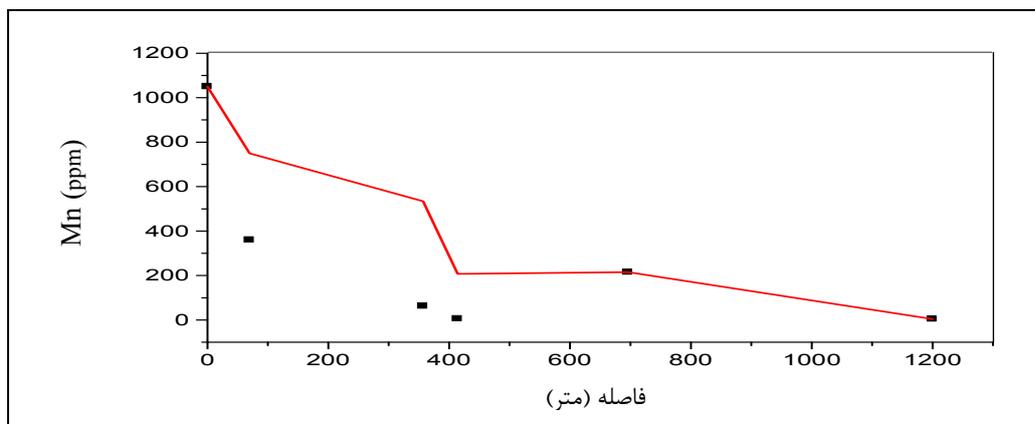
تأخیر برای یون های فلزی به طور میانگین در فاصله  $1/5$  تا  $2$  در نظر گرفته شده است (دولتی ارده جانی و

شفائی تنکابنی، ۱۳۸۸). نتایج مدل‌سازی در شکل‌های (۵-۸) تا (۵-۱۵) برای انتقال یون‌های فلزی مس، منگنز، آهن، کادمیم، سرب، کرم، مولیبدون و روی و در شکل‌های (۵-۱۶) و (۵-۱۷) برای سولفات و pH نشان داده شده است.

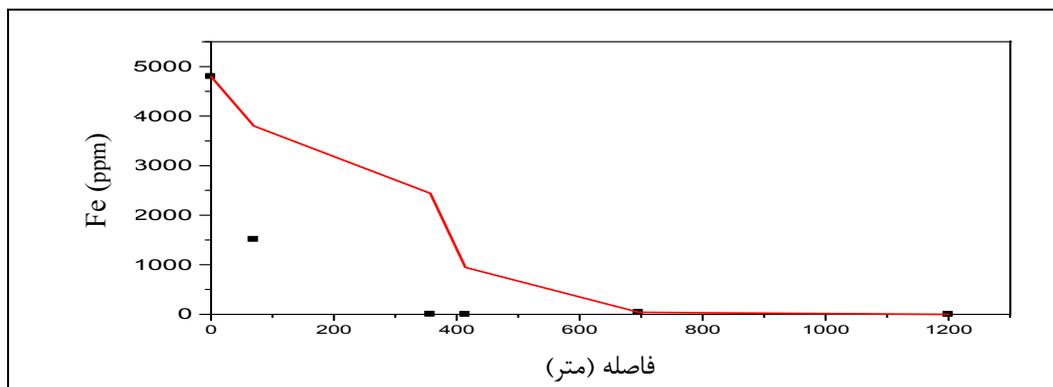
همانطور که از این شکل‌ها دیده می‌شود، روند تغییرات نتایج مدل حجم‌های محدود با داده صحرائی تطابق نسبتاً مناسبی دارد. روندی که این منحنی‌ها برای متغیرهای مختلف نشان می‌دهند به این صورت است که ابتدا مقدار غلظت یون‌های فلزی و سولفات تا فاصله ۴۱۴ متری از ورودی آلاینده‌ها به رودخانه شور یک روند کاهشی دارد و بلعکس مقدار pH تا این فاصله یک روند افزایشی نشان می‌دهد. از فاصله ۴۱۴ متری به بعد به علت وجود یک منبع تولید دیگر برای آلاینده‌های فلزی در اثر محلول نشتی هیپ شماره ۲ معدن به داخل رودخانه باز هم روند تغییرات غلظت برای یون‌های فلزی و سولفات به صورت صعودی است. تغییرات pH درست در جهت عکس است و این تغییرات با در نظر گرفتن و اعمال یک منبع تولید در فاصله ۶۹۶ متری از ورودی رودخانه شور که ناشی از ورود محلول‌های اسیدی حاوی یون‌های فلزی مربوط به هیپ شماره ۲ معدن به داخل رودخانه است، قابل توجیه است.



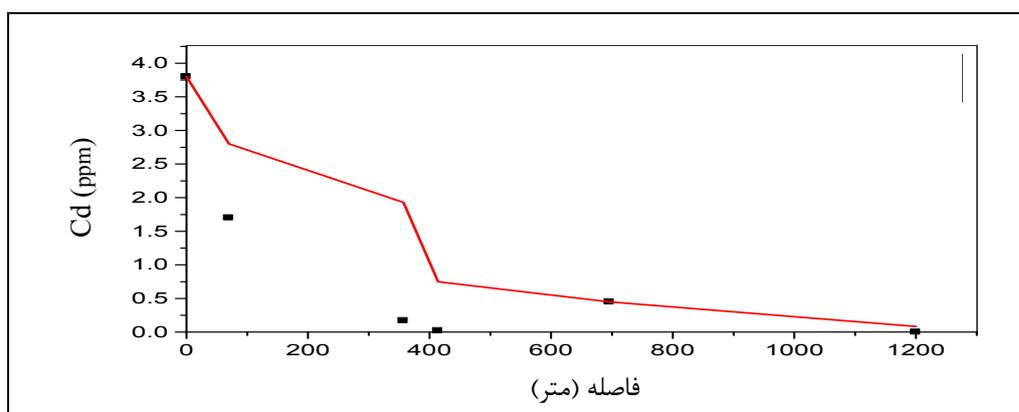
شکل (۵-۸): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرائی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز مس در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب خطی



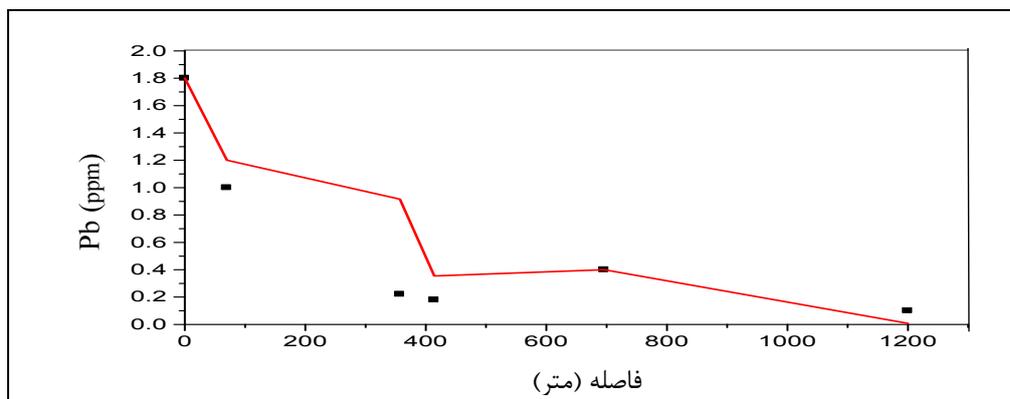
شکل (۵-۹): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز منگنز در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب خطی



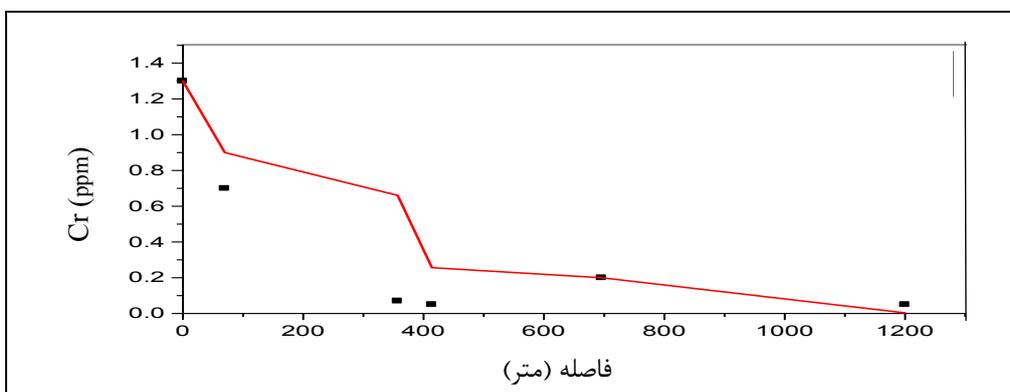
شکل (۵-۱۰): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز آهن در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب خطی



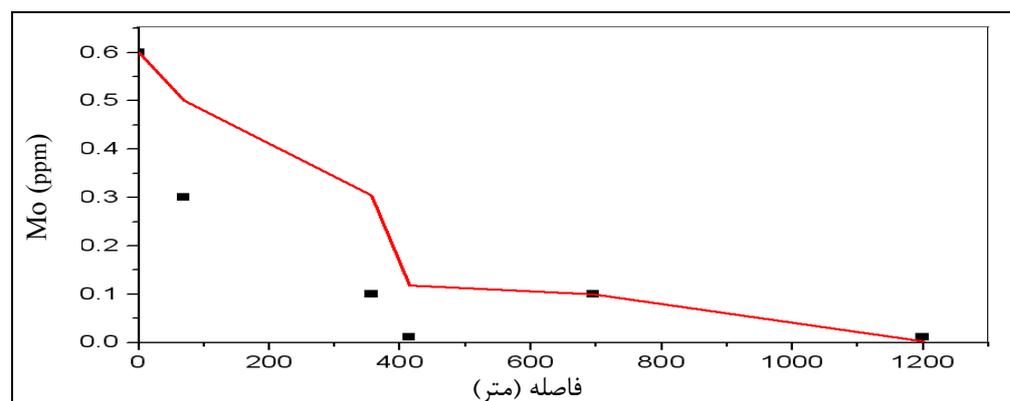
شکل (۵-۱۱): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز کادمیم در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب خطی



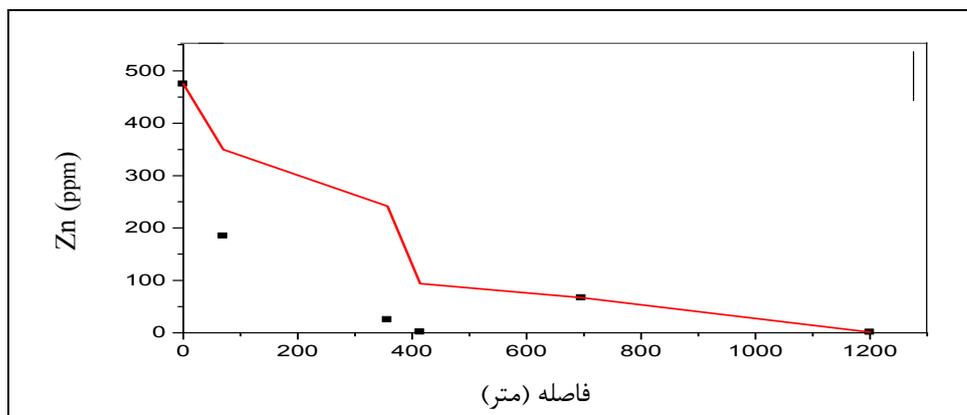
شکل (۵-۱۲): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز سرب در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب خطی



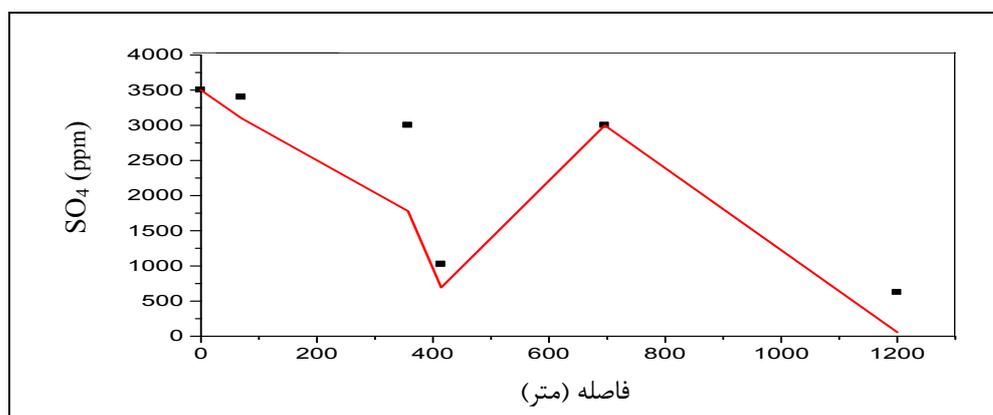
شکل (۵-۱۳): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز کروم در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب خطی



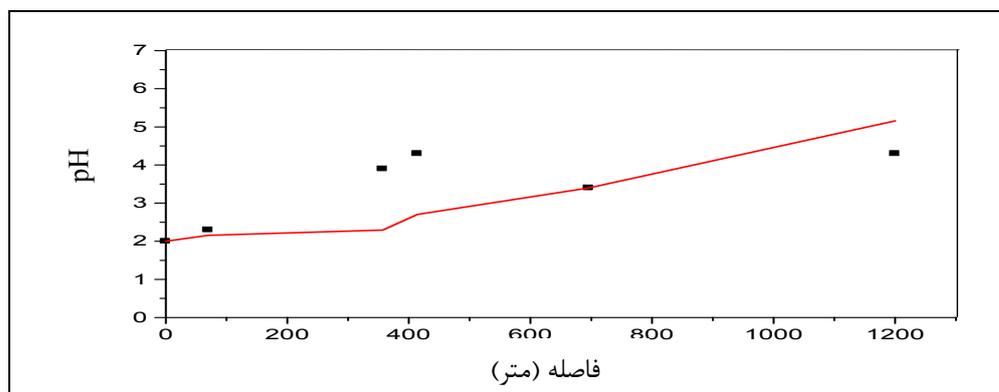
شکل (۵-۱۴): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز مولیبدون در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب خطی



شکل (۵-۱۵): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز روی در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب خطی



شکل (۵-۱۶): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت سولفات در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب خطی



شکل (۵-۱۷): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع pH در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب خطی

### ۵-۱۰-۳- مدل سازی انتقال یون های فلزی، سولفات و تغییرات pH در حالت یک بعدی در رودخانه شور، پایین دست معدن مس سرچشمه، با در نظر گرفتن فرآیند جذب غیرخطی با ایزوترم لانگمویر

ایزوترم های زیادی برای مدل کردن فرآیند جذب سطحی ارائه شده است ( Sheng and Smith, 1997). از مهمترین ایزوترم هایی که برای بیان تعادل بین یک جاذب و یک آلاینده فلزی مورد استفاده قرار می گیرد، معادله جذب لانگمویر<sup>۱</sup> می باشد (Doulati Ardejani, 2003). در بسیاری موارد معادله لانگمویر مناسب است. معادله لانگمویر به برهمکنش بین جاذب و ماده جذب شونده به عنوان یک واکنش شیمیایی تک لایه، برگشت پذیر و خطی مربوط می شود. این معادله توسط لانگمویر در سال ۱۹۱۵ بیان شد. این ایزوترم بر این فرض استوار است که نقاطی مستعد روی سطوح جاذب موجود بوده و هر کدام از این نقاط قادر به جذب یک مولکول می باشند، بنابراین لایه های جذب شده دارای ضخامت یک مولکول خواهند بود. مدل جذب لانگمویر را می توان به صورت رابطه (۳-۵) بیان کرد:

$$q_e = \frac{Q_0 K_l C_i}{1 + K_l C_i} \quad (3-5)$$

که در آن:

$q_e$  = بار تعادلی روی جاذب (mg/g)،

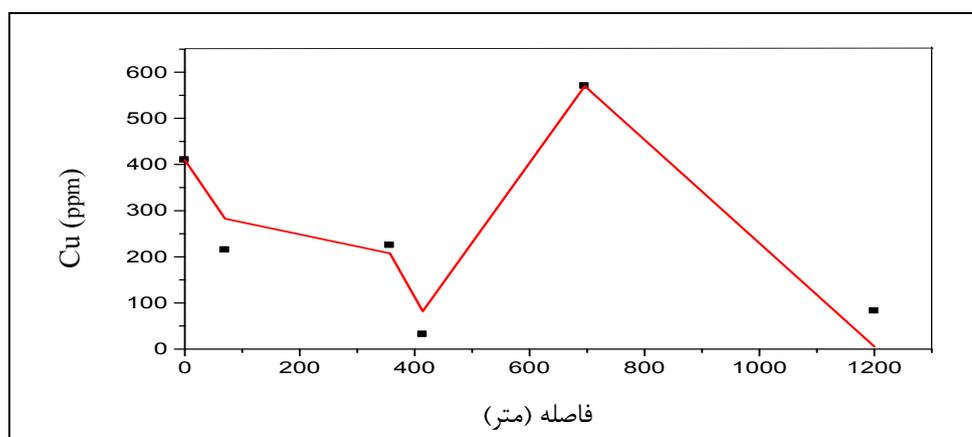
$Q_0$  = بیشترین ظرفیت جذب توسط جاذب (mg/g)،

$K_l$  = انرژی نسبی جذب سطحی (ثابت تجربی، قابل تعیین در آزمایشگاه)،

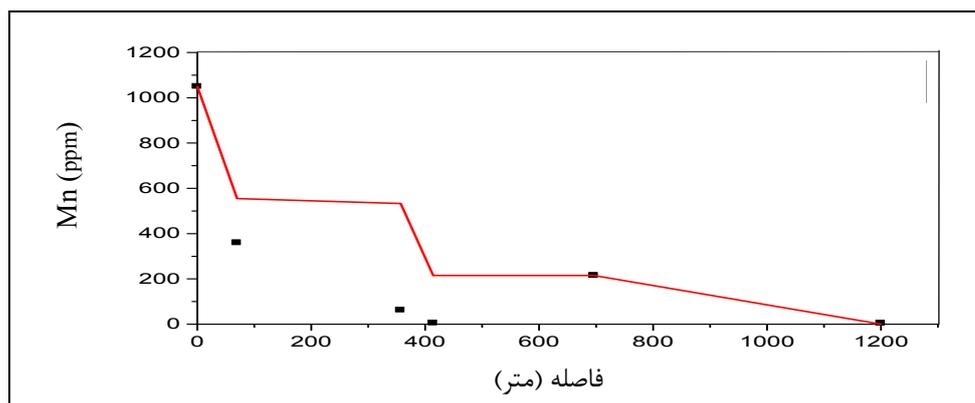
$C_i$  = غلظت تعادلی در سیستم (mg/L) (Gokmen and Serpen, 2002).

<sup>1</sup> Langmuir

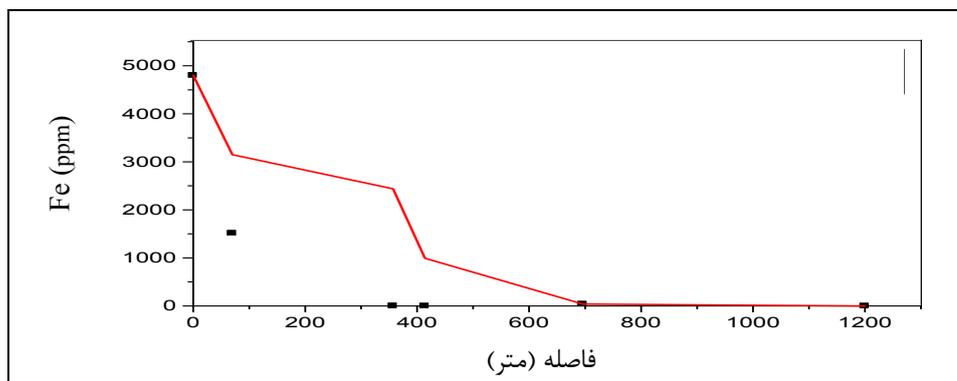
مدل‌سازی در شکل‌های (۵-۱۸) تا (۵-۲۵) برای یون‌های فلزی مس، منگنز، آهن، کادمیم، سرب، کرم، مولیبدون و روی و در شکل‌های (۵-۲۶)، (۵-۲۷) برای سولفات و pH نشان داده شده است. همانطور که از شکل‌های مذکور دیده می‌شود، روند تغییرات مدل حجم‌های محدود با داده صحرایی با در نظر گرفتن ایزوترم لانگمویر از تطابق بهتری نسبت به حالتی که جذب خطی است برخوردار است.



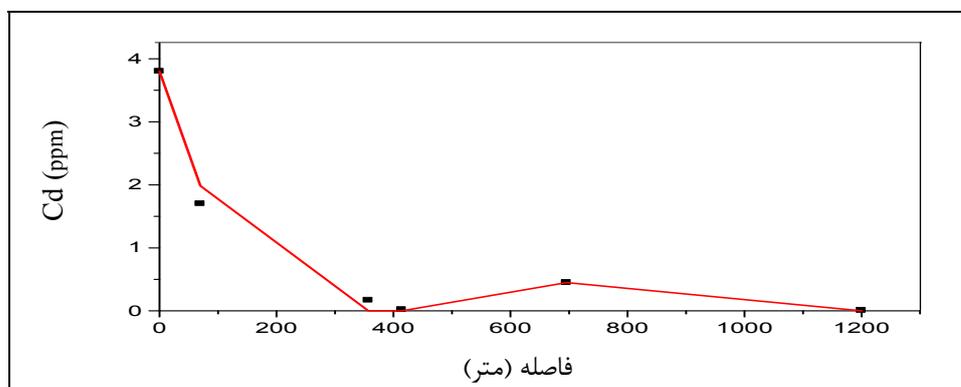
شکل (۵-۱۸): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز مس در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب غیرخطی لانگمویر



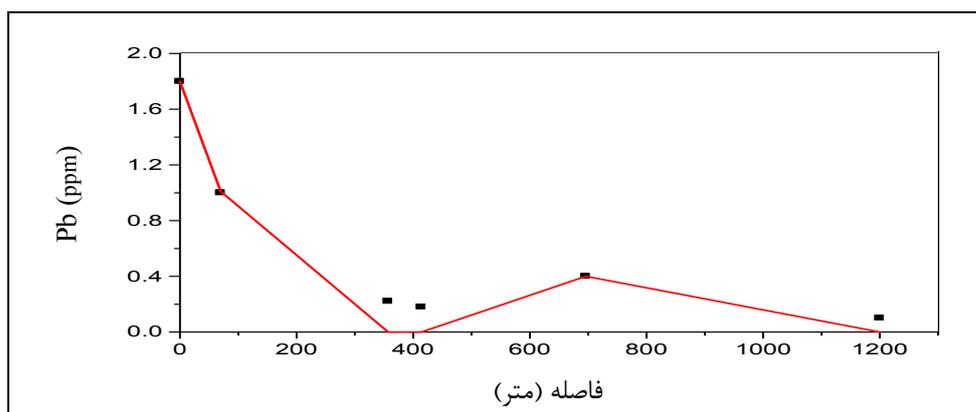
شکل (۵-۱۹): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز منگنز در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب غیرخطی لانگمویر



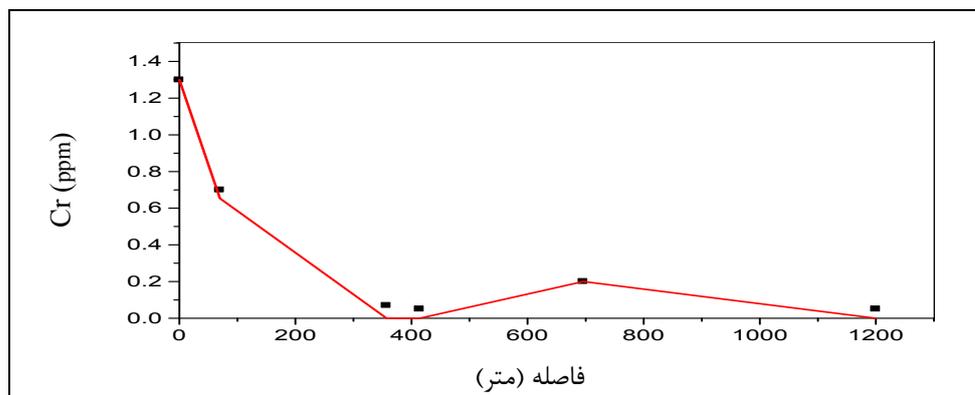
شکل (۵-۲۰): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز آهن در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب غیرخطی لانگمویر



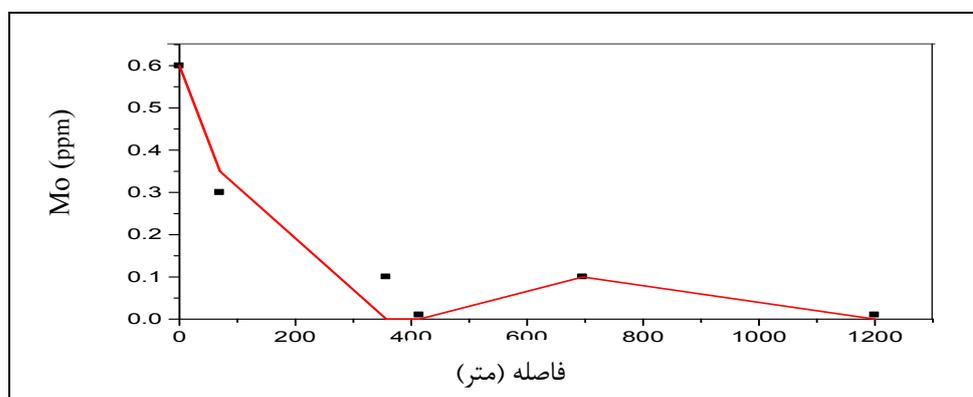
شکل (۵-۲۱): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز کادمیم در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب غیرخطی لانگمویر



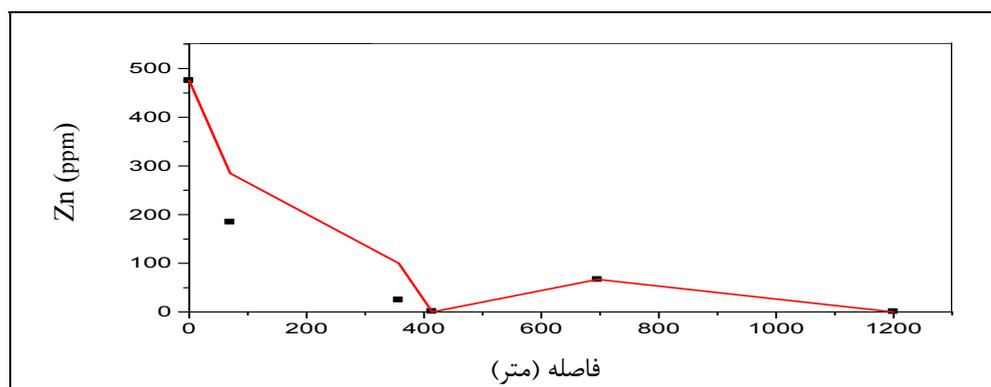
شکل (۵-۲۲): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز سرب در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب غیرخطی لانگمویر



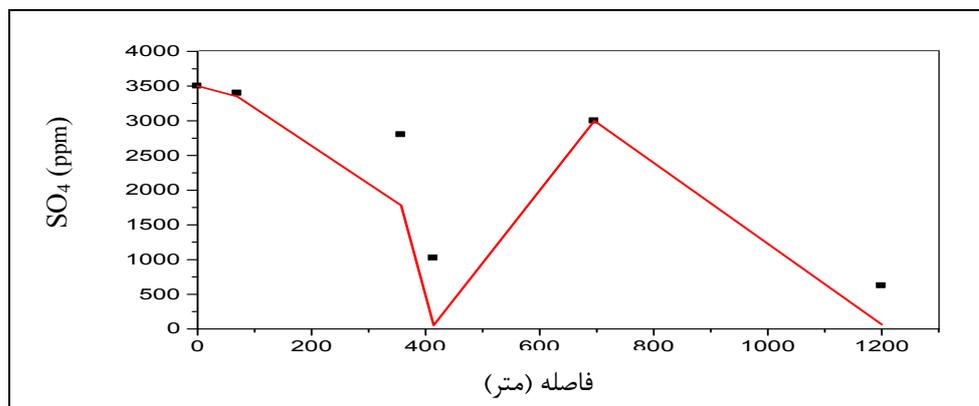
شکل (۲۳-۵): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز کروم در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب غیرخطی لانگمویر



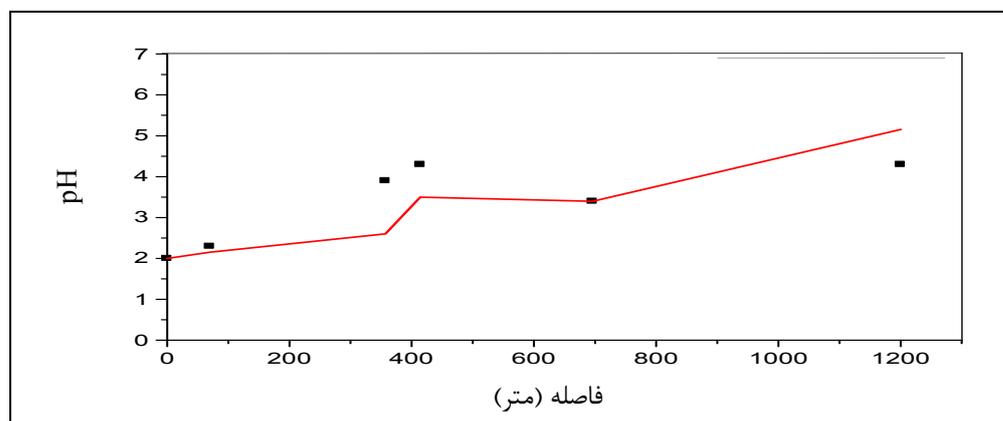
شکل (۲۴-۵): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز مولیبدون در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب غیرخطی لانگمویر



شکل (۲۵-۵): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت فلز روی در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب غیرخطی لانگمویر



شکل (۵-۲۶): مقایسه نتایج مدل سازی (خط) با داده های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت سولفات در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب غیرخطی لانگمویر



شکل (۵-۲۷): مقایسه نتایج مدل سازی (خط) با داده های صحرایی (نقطه) برای توزیع pH در رودخانه شور با در نظر گرفتن فرآیند جذب غیرخطی لانگمویر

## ۵-۱۰-۴- مدل سازی انتقال واکنشی آهن دوظرفیتی و تغییرات pH با در نظر گرفتن

### واکنش های آهن دوظرفیتی و جذب غیرخطی در رودخانه شور، معدن مس سرچشمه

طراحی سیستم های تصفیه جهت حفاظت منابع آب و مدیریت تکنولوژی های نیازمند آب و آب معدن تنها زمانی به طور کامل و درست انجام می شود که بر مبنای مدل های ریاضی مناسب باشد. مفهوم مدل های کیفیت آب با استفاده از غلظت گونه های  $[Fe^{2+}]$  و  $[H^+]$  در زهاب معادن توسعه داده

شده است. در این مدل ها، واکنش های اکسایش آهن دو ظرفیتی و تبدیل آن به آهن سه ظرفیتی در نظر گرفته شده است (Kaden and Lackner, 1984).

معدنی شدن منطقه سرچشمه باعث ایجاد مشکلاتی در کیفیت آب این منطقه شده است. این مشکلات که مربوط به آلودگی آب های معدنی و جوی می باشد، از اکسایش کانی های سولفیدی و ورود انواع نمک های فلزی محلول و زهاب های آلوده و ... به رودخانه شور نتیجه شده است. تخلیه زهاب اسیدی آهن دار مربوط به معدن و تأسیسات شستشوی توده ای کانه های کم عیار مس به داخل رودخانه شور تأثیر بسیار زیادی بر روی کیفیت آب این منطقه گذاشته است. واکنش شیمیایی مربوط به اکسایش آهن دو ظرفیتی و هیدرولیز آهن سه ظرفیتی به صورت واکنش (۴-۵) است:



آهن دو ظرفیتی که وارد رودخانه می گردد، توسط اکسیژن در رودخانه اکسید شده و آهن سه ظرفیتی به صورت هیدروکسید رسوب می کند. سینتیک این واکنش به مقادیر pH وابسته است.

#### ۵-۱۰-۴-۱- فرضیات و مبنای مدل های آب های سطحی

- واکنش های شیمیایی در داخل آب به شکل واکنش های یک طرفه با استوکیومتری کلی تا زمان اتمام مواد اولیه می باشد.

- در سطح آب ها اکسیژن برای فرآیندهای اکسیداسیون کافی بوده و فشار جزئی ثابت است.

- فرآیندهای انتقال به صورت یک بعدی است. همه اکسید آهن تشکیل شده در طی واکنش رسوب می کند، بنابراین به هیچ نوع مدل سازی ریاضی برای فرآیند ترسیب نیازی نخواهد بود.

- واکنش های شیمیایی شناخته شده برای مدل در سیستم تک فاز، واکنش های اکسیژن دهی Fe(II) و هیدرولیز Fe(III) هستند.

- سینتیک اکسیژن دهی اکسید آهن (II) در سیستم های آزمایشگاهی با توجه به مطالعات گذشته و قانون نرخ کلی به صورت رابطه (۵-۵) است (Kaden, 1985):

$$r_{Fe} = \frac{\partial[Fe^{2+}]}{\partial t} = -k[OH^-]P_{O_2}[Fe^{2+}] = \frac{-k P_{O_2} K_w [Fe^{2+}]}{[H^+]^2} \quad (5-5)$$

که در آن:

K = ثابت سرعت بر حسب  $mol^{-2} L^2 min^{-2} bar^{-1}$

$[OH^-]$  = غلظت یون های هیدروکسید،

$[Fe^{2+}]$  = غلظت یون های آهن دو ظرفیتی است.

معاله (۵-۵) را می توان به صورت زیر هم نوشت:

$$r_{Fe} = -\frac{\partial[Fe^{2+}]}{\partial t} = k_1[Fe^{2+}] \quad (6-5)$$

$$k_1 = \frac{-k P_{O_2} K_w [Fe^{2+}]}{[H^+]^2} = \frac{k^*}{[H^+]^2} \quad (7-5)$$

که در آن واحد  $k_1$  عکس زمان است ( $1.6 \times 10^{-13} < k_1 < 13 \times 10^{-13}$ ). حال می توان نوشت:

$$r_{Fe} = \frac{k^* [Fe^{2+}]}{[H^*]^2} \quad (8-5)$$

در تغییر Fe(II) به هیدروکسید آهن(III) نسبت استوکیومتری میان پروتون و توده آهن(II) نسبت  $K_{Fe}$  عبارتست از:

$$K_{Fe} = \frac{[H^+]}{[Fe^{2+}]} = 3.58 \times 10^{-2} \left( \frac{mol H^+}{gr Fe^{2+}} \right) \quad (9-5)$$

نشان دادن روابط بالا مبنای مهم برای توسعه مدلی است که در ادامه خواهد آمد.

#### ۵-۱۰-۴-۲- ارائه مدل انتقال رودخانه شور

وجود هوای زیاد در آب رودخانه فراهم کننده اکسیژن کافی برای ترسیب Fe(III) می باشد. پروتون های تشکیل شده با مصرف ظرفیت بافر یون های کربنات خنثی خواهند شد. تغییر pH به طور تقریبی در غلظتی معادل  $pH \times (3.58 \times 10^{-2})$  به ازای هر گرم Fe(II) روی می دهد.

بامرت و همکاران در مدل رودخانه هم از پراکندگی هیدروینامیکی و هم از مؤلفه نفوذ چشم پوشی کرده اند و پهنرفت را تنها مکانیسم مؤثر بر انتقال آلاینده در رودخانه لحاظ نمودند. اما در تحقیق حاضر برای رودخانه شور پراکندگی هیدروینامیکی هم در نظر گرفته شده است.

تغییر غلظت Fe(II) در رودخانه در اثر اکسیداسیون و هیدرولیز به صورت تقریبی با یک واکنش مرتبه اول قابل توجیه می باشد. اگر رابطه  $v(\partial c / \partial x) = (\partial c / \partial t)$  در تمام قسمت های رودخانه درست باشد، مدل رودخانه به صورت روابط (۶-۱۰) و (۶-۱۱) خواهد بود (Kaden, 1985):

$$Fe^{2+} : -v \frac{\partial [Fe^{2+}]}{\partial x} = \frac{\partial [Fe^{2+}]}{\partial t} = \frac{k}{[H^+]^2} [Fe^{2+}] \quad (10-5)$$

$$H^+ : -v \frac{\partial [H^+]}{\partial x} = \frac{\partial [H^+]}{\partial t} = k_{Fe} \frac{\partial [Fe^{2+}]}{\partial t} \quad (11-5)$$

با توجه به آنچه گفته شد، عبارات غیرخطی مربوط به اکسایش آهن دو ظرفیتی و هیدرولیز آهن سه ظرفیتی که برای رودخانه شور در نظر گرفته شده است، به ترتیب برای یون های آهن دو ظرفیتی و  $H^+$  به صورت روابط (۱۲-۵) و (۱۳-۵) در معادلات دیفرانسیل جزئی آنها وارد می شود:

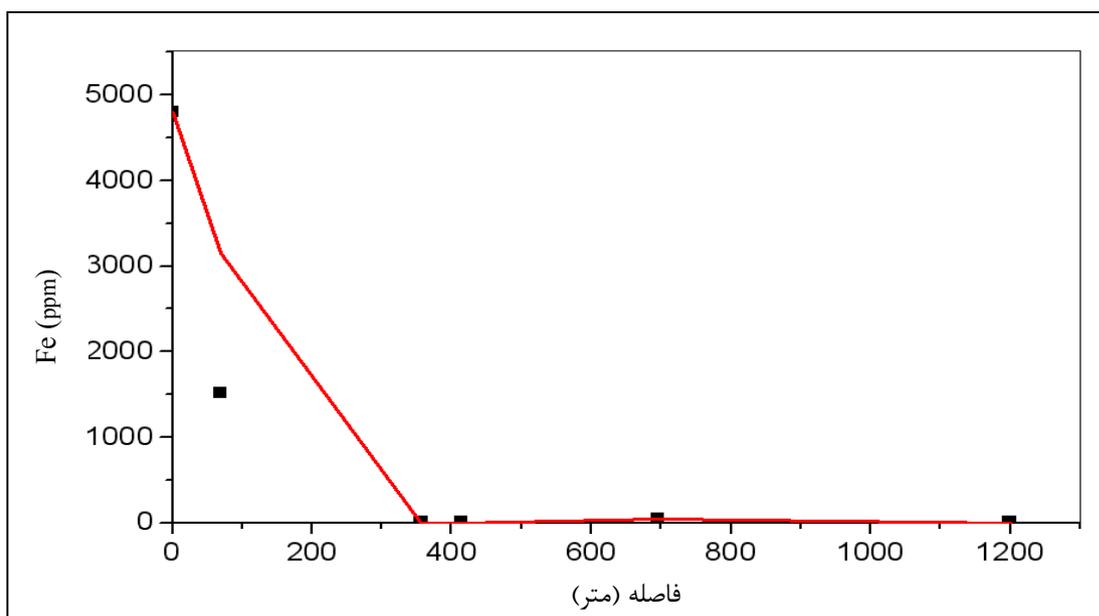
$$\{C = [Fe^{2+}]\} \Leftrightarrow \frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{k}{[H^+]^2} [Fe^{2+}] \quad (12-5)$$

$$\{C = [H^+]\} \Leftrightarrow \frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{k * k_{Fe}}{[H^+]^3} [Fe^{2+}][H^+] \quad (13-5)$$

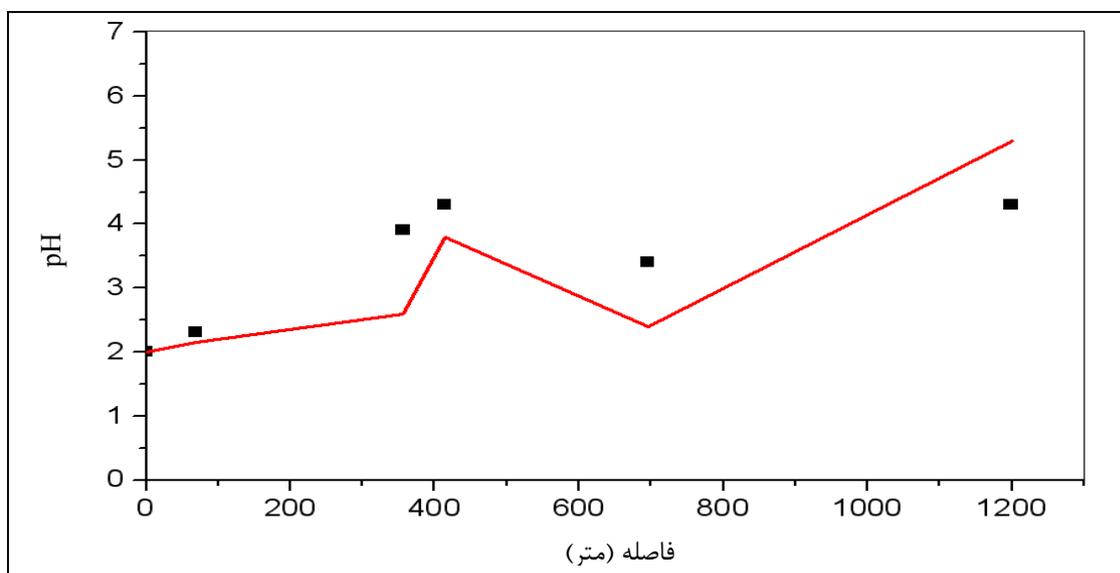
مقادیر  $k$  و  $k_{Fe}$  به ترتیب برابر  $0/0385$  و  $2 \times 10^{-13}$  در معادله فوق قرار می گیرند.

نتایج حل عددی دو معادله (۱۲-۵) و (۱۳-۵) در شکل های (۲۸-۵) و (۲۹-۵) نشان داده شده است. همانطور که از شکل ها دیده می شود تطابق مدل عددی حجم های محدود در حالت در نظر گرفتن واکنش های شیمیایی اکسایش آهن دو ظرفیتی و هیدرولیز آهن سه ظرفیتی در محیط نسبت به مدل جذب خطی و مدل جذب غیر خطی لانگمویر بهتر است.

در واقع در حالتی که واکنش های اکسایش آهن دو ظرفیتی و هیدرولیز آهن سه ظرفیتی در محیط لحاظ می شوند، رفتار سینتیکی یون های آهن دو ظرفیتی و اسیدیته به طور همزمان باید در نظر گرفته شود. شکل های (۲۸-۵) و (۲۹-۵) خود گویای این مطلب است.



شکل (۵-۲۸): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع غلظت  $Fe^{2+}$  در رودخانه شور با در نظر گرفتن سینتیک جذب غیرخطی، واکنش اکسیداسیون آهن دو ظرفیتی و اسیدیته متغیر



شکل (۵-۲۹): مقایسه نتایج مدل‌سازی (خط) با داده‌های صحرایی (نقطه) برای توزیع pH در رودخانه شور با در نظر گرفتن سینتیک جذب غیرخطی، واکنش اکسیداسیون آهن دو ظرفیتی و اسیدیته متغیر

## فصل ششم

# نتیجه‌گیری و پیشنهادات

## ۶-۱- نتایج

## ۶-۱-۱- نتایج مدل سازی عددی در دو حالت پیوسته و یا لحظه‌ای منبع تولید آلاینده

مدل سازی عددی در حالت یک بعدی، چه در حالتی که منبع تولید آلاینده پیوسته و چه در حالتی که منبع لحظه‌ای است، تطابق خوبی با نتایج حاصل از روش تحلیلی دارد، بطوری که در حالت پیوسته مقدار خطا زیر ۱ درصد و در حالت لحظه‌ای مقدار خطا زیر ۲ درصد است و این تأییدی بر صحیح بودن مدل سازی یک بعدی در هر دو حالت منبع تولید آلودگی می باشد. علت اینکه در حالت یک بعدی مقدار خطای حالت گسسته کمی بیشتر (حدوداً ۱ درصد) از حالت پیوسته است، به محدود بودن مدت زمان ورود آلاینده و همچنین سرعت بالای جریان آب در روخانه بر می گردد. هر چند که در دو حالت سرعت یکسان است اما در حالت منبع لحظه‌ای این سرعت بالا باعث ایجاد تغییر در توزیع غلظت می شود.

پس از اعتبار سنجی مدل در حالت یک بعدی، مدل سازی انتقال آلاینده به دو بعد تعمیم داده شد. با توجه به اینکه مدل سازی در حالت یک بعدی معتبر بوده و تطابق خوبی بین نتایج روش های عددی و تحلیلی حاصل شد، لذا مدل دوبعدی می تواند پیش بینی نسبتاً خوبی برای توجیه توزیع آلاینده های محلول در آب های سطحی و فرآیندهای رقیق سازی آنها ارائه نماید.

با توجه به اینکه عمق رودخانه واحد در نظر گرفته شده و از طرفی آلاینده به طرف عمق هم پخش می شود و این پدیده در فرآیند مدل سازی در نظر گرفته نشده است، این مؤلفه هم می تواند باعث ایجاد خطای مدل سازی گردد. نتایج نشان می دهد که آلاینده با هر دو منبع پیوسته و لحظه‌ای در زمان های ۲، ۵، ۱۰، ۱۵، ۲۰ و ۲۵ ثانیه به ترتیب به فاصله ۲/۵، ۶/۵، ۱۴، ۲۲، ۲۷ و ۳۰ متری از محل ورود آلاینده (ورودی مدل) می رسد. با این تفاوت که در حالت منبع لحظه‌ای غلظت آلاینده در یک محل مشخص به دلیل محدود بودن منبع تولید آن، به تدریج افزایش و سپس کاهش می یابد. دو مؤلفه پراکندگی مکانیکی

و پهنرفت مهمترین مکانیزم‌های انتقال آلودگی از طریق آب رودخانه می‌باشند. نقش نفوذ مولکولی در رقیق‌سازی آلودگی قابل اغماض است.

## ۶-۱-۲- نتایج مدل‌سازی عددی جذب بیولوژیکی فلزات مس و منگنز در زهاب اسیدی

### معدن مس سرچشمه توسط بیومس قارچی اسپرژیلوس نایجر در یک رآکتور پیوسته

جذب بیولوژیکی یون‌های فلزی  $\text{Cu}^{2+}$  و  $\text{Mn}^{2+}$  از زهاب معدن مس سرچشمه توسط بیومس قارچی گونه اسپرژیلوس نایجر مرده در یک رآکتور پیوسته به صورت عددی مدل‌سازی شد. در ابتدا، مدل عددی حجم‌های محدود در دو حالت بدون جذب و با در نظر گرفتن جذب خطی کالیبره شد. سپس مدل عددی مذکور برای حالات پیچیده‌تر که شامل جذب غیرخطی با ایزوترم لانگمویر و سینتیک مرتبه دوم یون-نلسون است، بسط داده شد. در حالتی که جذب به صورت خطی است، در نظر گرفتن فاکتور تأخیر باعث می‌شود که آلاینده نسبت به حالتی که جاذب در محیط وجود ندارد با تأخیر به نقطه شکست برسد. فاکتور تأخیر یا R برای یون‌های فلزی مس و منگنز به ترتیب برابر ۲ و ۱/۵ حاصل شد.

نتایج آزمایشگاهی و مدل‌سازی عددی برای جذب غیرخطی با در نظر گرفتن ایزوترم لانگمویر، نشان می‌دهد که تحت دبی‌های ۲، ۴ و ۶ میلی لیتر بر دقیقه، منحنی‌های رخنه مربوط به فلز مس به ترتیب پس از زمان‌های ۳۵۵، ۲۷۵ و ۲۰۵ دقیقه به نقطه شکست رسید. این در حالی است که تحت همین دبی‌ها، منحنی‌های رخنه مربوط به فلز منگنز به ترتیب پس از زمان‌های ۳۰۰، ۲۰۰ و ۱۵۰ دقیقه به نقطه شکست راه یافت.

همچنین نتایج آزمایشگاهی و مدل‌سازی عددی برای جذب غیرخطی با در نظر گرفتن سینتیک شبه مرتبه دوم یون-نلسون، نشان می‌دهد که تحت دبی‌های ۲، ۴ و ۶ میلی لیتر بر دقیقه، منحنی‌های

رخنه مربوط به فلز مس به ترتیب پس از زمان‌های ۳۵۵، ۲۷۵ و ۲۰۵ دقیقه به نقطه شکست رسید. این در حالی است که تحت همین دبی‌ها، منحنی‌های مربوط به فلز منگنز به ترتیب پس از زمان‌های ۲۸۵، ۱۹۰ و ۱۶۵ دقیقه به نقطه شکست راه یافت.

در نظر گرفتن ایزوترم جذب لانگمویر برای فلز مس و سینتیک مرتبه دوم یون- نلسون برای فلز منگنز در مدل عددی دارای تطابق بسیار بالاتری با داده‌های آزمایشگاهی است.

در سرعت‌های مختلف، زودتر رسیدن فلز منگنز به نقطه شکست نسبت به مس نشان دهنده این واقعیت است که جذب منگنز نسبت به فلز مس توسط گونه قارچی آسپرژیلوس نایجر کمتر است. افزایش دبی زهاب ورودی حاوی یون‌های فلزی به ستون، زمان تماس جاذب بیولوژیکی را با زهاب کوتاه‌تر کرده و جاذب سریعتر اشباع می‌شود و باعث می‌گردد تا منحنی‌های مربوط به یون‌های فلزی زودتر به نقطه شکست برسد.

افزایش دبی جریان تطابق مناسب بین نتایج مدل‌سازی و داده‌های آزمایشگاهی را کمی کاهش می‌دهد. استفاده از چنین مدل‌هایی می‌تواند برای انتخاب روش‌های مناسب تصفیه و کاهش اثرات آلودگی به کار برده شود.

نتایج آنالیز حساسیت در مدل جذب ایزوترم لانگمویر نشان داد که افزایش بیشترین ظرفیت جذب ( $Q_0$ )، افزایش ثابت لانگمویر ( $K_1$ ) و افزایش چگالی بالک جاذب ( $\rho_b$ ) مقدار جذب توسط جاذب را افزایش داد. البته تأثیر پارامترهای  $Q_0$  و  $\rho_b$  بیشتر از پارامتر  $K_1$  است. در واقع تأثیر پارامتر  $K_1$  به صورت مستقیم است هر چند که تأثیر آن بیشتر مربوط به زمان‌های اولیه است. همچنین نتایج آنالیز حساسیت در مدل جذب سینتیکی یون- نلسون نشان داد که اثر تغییر پارامتر  $K_2$  به این صورت است که افزایش

$K_2$  به صورت بسیار ناچیزی میزان جذب را افزایش می‌دهد و افزایش  $q_e$  میزان جذب را افزایش داده و راندمان رآکتور را بالا می‌برد.

همچنین بررسی‌ها نشان داد که میزان جذب توسط جاذب با تغییر طول مدل متغیر است. میزان جذب توسط جاذب با افزایش طول مدل افزایش می‌یابد. در واقع می‌توان گفت که اگر طول مدل ۵ برابر شود، زمان رسیدن به نقطه شکست بیش از ۶ برابر افزایش می‌یابد.

### ۶-۱-۳- نتایج مدل‌سازی عددی فرآیندهای حاکم بر انتقال و تحول آلاینده‌های فلزی

#### ناشی از تولید زهاب اسیدی در رودخانه شور پایین دست معدن مس سرچشمه

در این بخش ابتدا روند تغییرات یون‌های فلزی مس، منگنز، آهن، کادمیم، سرب، کرم، مولیبدون و روی، سولفات و اسیدیتته آب رودخانه شور مورد بررسی قرار گرفت. غلظت فلزات مذکور از بالادست به سمت پایین رودخانه به علت اختلاط با آب‌های غیرآلوده و جذب فلزات مذکور در حین انتقال کاهش می‌یابد. روند تغییر سولفات هم درست مانند یون‌های فلزی است. روند تغییر pH عکس روند فلزات است، یعنی از بالادست به سمت پایین رودخانه، مقدار pH افزایش می‌یابد و این مسئله به این معناست که اسیدیتته یا غلظت یون  $H^+$  در اثر اختلاط با آب‌های غیرآلوده پایین دست رودخانه کاهش می‌یابد.

مدل حجم‌های محدود در سه حالت مختلف جذب (جذب خطی، جذب غیر خطی با اعمال ایزوترم لانگمویر و جذب غیر خطی با اعمال واکنش‌های مربوط به اکسایش آهن دو ظرفیتی و هیدرولیز آهن سه ظرفیتی) مورد بررسی قرار گرفت. برای اعتبار سنجی مدل از داده‌های صحرایی استفاده شد. نتایج به دست آمده نشان داد که عبارت جذب رفتاری کاملاً غیر خطی داشته و جذب غیر خطی با اعمال واکنش‌های مربوط به اکسایش آهن دو ظرفیتی و هیدرولیز آهن سه ظرفیتی از تطابق بهتری نسبت به

جذب غیرخطی با اعمال ایزوترم لانگمویر و جذب خطی برخوردار است. همچنین روند تغییرات مدل حجم‌های محدود با داده صحرائی با در نظر گرفتن ایزوترم لانگمویر از تطابق بهتری نسبت به حالتی که جذب خطی است برخوردار است.

روندی که این منحنی‌ها برای متغیرهای مختلف نشان می‌دهند به این صورت است که ابتدا مقدار غلظت یون‌های فلزی و سولفات تا فاصله ۴۱۴ متری از ورودی آلاینده‌ها به رودخانه شور یک روند کاهشی دارد و بلعکس مقدار pH تا این فاصله یک روند افزایشی نشان می‌دهد. از فاصله ۴۱۴ متری به بعد به علت وجود یک منبع تولید دیگر برای آلاینده‌های فلزی در اثر محلول نشتی هیپ شماره ۲ معدن به داخل رودخانه باز هم روند تغییرات غلظت برای یون‌های فلزی و سولفات به صورت صعودی است. تغییرات pH درست در جهت عکس است و این تغییرات با در نظر گرفتن و اعمال یک عبارت تولید در فاصله ۶۹۶ متری از ورودی رودخانه شور که ناشی از ورود محلول اسیدی حاوی فلزات مربوط به هیپ شماره ۲ معدن به داخل رودخانه است، قابل توجیه است.

در مدل مربوط به رودخانه شور تغییر غلظت Fe(II) در رودخانه در اثر اکسیداسیون و هیدرولیز به صورت تقریبی با یک واکنش مرتبه اول قابل توجیه می‌باشد. در واقع اینگونه اثبات می‌شود که رفتار عبارت مصرف در نظر گرفته شده کاملاً غیرخطی است و در واقع در حالتی که واکنش‌ها در محیط لحاظ می‌شوند، رفتار سینتیکی یون‌های آهن دو ظرفیتی و اسیدیته به طور همزمان باید در نظر گرفته شود.

## ۶-۲- پیشنهادات

\* نتایج حاصل از این مدل‌سازی می‌تواند در توسعه برنامه‌های مدیریت زیست محیطی جهت پایش آلودگی آب رودخانه‌ها و درک مکانیسم‌های حاکم بر انتقال آلاینده‌ها مؤثر واقع گردد.

\* با توجه به اینکه مدل ارائه شده برای رودخانه شور در حالت یک بعدی از اعتبار کافی برخوردار می‌باشد، مدل‌سازی را می‌توان در حالت دو بعدی و یا سه بعدی بررسی کرده و خطای مدل‌سازی را کاهش داد.

\* در نیم مدل ارائه شده برای رودخانه شور می‌توان با مطالعه واکنش‌های موجود در محیط توزیع فلزات دیگر و سولفات را هم مدل‌سازی نمود.

## منابع فارسی

- اورندی، س. ۱۳۸۵. تاثیر دمپ‌های باطله در ایجاد زهاب اسیدی معدن مس سرچشمه. پایان‌نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه تربیت معلم تهران.
- بنی اسدی، ع. ۱۳۸۶. بررسی هیدرولوژیکی و زیست محیطی هیپ شماره ۳ معدن مس سرچشمه. پایان‌نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه صنعتی شاهرود.
- دولتی اردجانی، ف و شفایی تنکابنی، ض. ۱۳۸۸، مدل‌سازی زمین زیست‌محیطی، دانشگاه صنعتی شاهرود، چاپ اول، ص ۴۳-۸۴.
- دولتی ارده‌جانی ف، شفایی تنکابنی ض، میرحبیبی ع. ر، بدیعی خ، ۱۳۸۴، بیوتکنولوژی، ژئوشیمی زیست‌محیطی و مدیریت پساب‌ها، جلد اول، چاپ اول، پژوهشکده صنایع رنگ ایران، تهران، ص ۱۹۱-۲۲۱.
- دولتی ارده جانی، ف، مرنندی، ر، سلیمانی فر، ه، ۱۳۸۸، " استخراج بیولوژیکی یون های مس و منگنز از آب زهکش اسیدی با استفاده از گونه قارچی آسپرژیلوس نایجر، فصلنامه علمی- پژوهشی علوم و تکنولوژی محیط زیست (در نوبت چاپ).
- شفیعی، ب، ۱۳۷۹. مطالعه رخداد و پراکندگی ژئوشیمیایی و مدل فلززائی طلا و نقره در کانسار مس پورفیری سرچشمه، پایان نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه شهید باهنر کرمان.
- شهاب پور، ج، ۱۳۷۶. پیدایش کانسار سرچشمه. دومین سمپوزیوم معدنکاری ایران، دانشگاه شهید باهنر کرمان.
- گزارشات بخش زمین شناسی معدن مس سرچشمه، ۱۳۸۵، مجتمع مس سرچشمه.

## منابع لاتین

- Aaron A.J., David J.K. and Thomas L.Y. (1982). "Multicomponent equilibrium chemistry in groundwater quality model", Water Resources Research, Vol. 18, No. 4, pp. 1089-1096.
- Albert J.V, Robert L.S. and Paul V.R. (1981). "Transport of ion-exchanging solutes in groundwater: Chromatographic theory and field simulation", Water Resources Research, Vol. 17, No. 5, pp. 1517-1527.
- Ani E.C., Wallis S., Kraslawski A. and Serban Agachi P. (2009). "Development, calibration and evaluation of two mathematical models for pollutant transport in a small river", Environmental Modelling & Software, Vol. 24, pp. 1139-1152.

- Bani Assadi A., Doulati Ardejani F., Karami G.H., Dahr Azma B., Atash Dehghan R. and Alipour M. (2008). "**Heavy metal pollution problems in the vicinity of heap leaching No. 3 of Sarcheshmeh porphyry copper mine**", 10th International Mine Water Association Congress, June 2-5, 2008, Karlovy Vary, Czech Republic, pp. 355-358.
- Biak J. and Kim J. (2002). "**On the escape of pollutant from urban street canyons**", Atmospheric Environmental, Vol. 36, pp. 527-536.
- Bibi M.H., Ahmed F. and Ishiga H. (2007). "**Geochemical study of arsenic concentrations in groundwater of the Meghna River Delta, Bangladesh**", Geochemical Exploration, Vol. 97, pp. 43-58.
- Binning, P. and Celia, M.A. (1996). "**A finite volume Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for solution of the Contaminant transport equations in two-dimensional multiphase flow systems**", Water Resources Research, Vol. 32, No. 1, pp.103-114.
- Cathles L.M. and Apps J.A. (1975). "**A Model of the dump leaching process that incorporates oxygen balance, heat balance and air convection**". Metallurgical Transactions. Vol 6B, pp.617-624.
- Cathles L.M. (1979). "**Predictive capabilities of a finite difference model of copper leaching in low grade industrial sulfide waste dumps**", Mathematical Geology, Vol.11, No.2, pp.175-191.
- CHAM. (2007). "**The PHOENICS On-Line information system**", [http://www.cham.co.uk/phoenics/d\\_polis/polis.htm](http://www.cham.co.uk/phoenics/d_polis/polis.htm)
- Chen M., Soulsby C. and Younger P.L. (1999). "**Modeling the evolution of mine water pollution at Polkemmet Colliery, Almond catchment**", Scotland. Quarterly, Engineering Geology, Vol.32, No.4, pp. 351-362.
- Davis G.B. and Ritchie A.I.M. (1986a). "**A model of oxidation in pyritic mine wastes: part 1: Equations and approximate solution**". Applied Mathematical Modeling, Vol.10, No.5, pp.314-322.
- Davison M.M., Paulo V.F.N. and Jonas C.C. (2005). "**Analytical solution of the eulerian dispersion equation for nonstationary: Development and evaluation**", Environmental Modeling and Software, Vol. 20, pp. 1159-1165.
- Domenico P.A. and Schwartz F.W. (1990). "**Physical and chemical hydrogeology**", 1st edition, John Wiley & Sons, Inc., New York, 824 p.
- Doulati Ardejani F., Badii Kh., Yousefi Limaee N., Shafaei S.Z. and mirhabibi A.R. (2008b). "**Adsorption of Direct Red 80 dye from aqueous solution on to almond shell: Effect of pH, initial concentration and shell type**", Hazardous Materials, Vol.151, Issues 2-3, pp. 730-737.
- Doulati Ardejani F., Karami G.H., Bani Assadi A. and Atash Dehghan R., (2008a), "**Hydrogeochemical investigations of the Shour River and groundwater affected by acid mine drainage in Sarcheshmeh porphyry copper mine**", 10th

International Mine Water Association Congress, June 2-5, 2008, Karlovy Vary, Czech Republic, pp. 235-238.

Doulati ardejani F., Sing R.N., Baafi E.Y. (2004a). " **Use of PHOENICS for solving one dimensional mine pollution problems**", Journal of PHOENICS: Computational Fluid Dynamics & its applications, Vol.16, CHAM, UK, 23 p.

Doulati Ardejani F., Singh, R.N. and Baafi E.Y. (2004b). "**Numerical modeling of ion-exchanging solute transport in groundwater systems**". The PHOENICS Journal of Computational Fluid Dynamics and its Applications, Vol.16, CHAM, UK, 18p.

Doulati Ardejani, F. (2003). "**Hydrogeological investigation of backfilled Surface of Coal Mine Site**", PHD Thesis, University of Wollongong, Australia, 435 p.

Edwads J.S., Ren T.X. and Josefowicz R. (1995). "**Using computational fluid dynamics (CFD) to solve mine safety and health problems**", APCOM xxv, Technical Proceeding, Application of Computers and Operations Research in the Mineral Industries, Brisbane, Australia, 9-14 July 1995, pp 41- 47.

Equeenuddin Sk.Md., Tripathy S., Sahoo P.K. and Panigrahi M.K. (2009). "**Hydrogeochemical characteristics of acid mine drainage pollution at Makum Coalfield, India**", Geochemical Exploration, Accepted Manuscript, 10p.

Eriksson, N. and Destouni, G. (1997). "**Combined effects of dissolution kinetics, secondary mineral precipitation and preferential flow on copper leaching from mining waste rock**", Water Resources Research, Vol.33, No.3, pp.471-483.

Foster I.D.L and Charles S.M.W. (1996). "**Heavy metal In hydrological cycle: Trends and explanations hydrological processes**", Vol.10, pp. 227–267.

Frind E.O. and Germain D. (1986). "**Simulation of contaminant plumes with large dispersive contrast: Evaluation of alternating direction Galerkin models**", Water Resources Research, Vol. 22, No. 13, pp. 1857-1873.

GEO-SLOPE International, **CTRAN/W User's Guide**, (2005), Version 5, 331pp.

Gin K.Y., Tang Y.Z. and M.A. Aziz. (2002). "**Derivation and application of a new model for heavy metal biosorption by algae**", Water Resource, Vol. 36, pp. 1313-1323.

Gokmen V. and Serpen A. (2002). "**Equilibrium and kinetic studies on the adsorption of dark colored compounds from apple juice using adsorbent resin**", Food Engineering, Vol.53, pp .221-227.

Gray W.G. and Pinder G.F. (1976). "**An analysis of the numerical solution of the transport equation**", Water Resources Research, Vol. 12, No. 3, pp. 547-555.

Green, S.R. and Clothier, B.E. (1994). "**Simulation water and chemical movement into unsaturated soils**", The PHOENICS Journal of Computational Fluid Dynamics and Its Applications, Vol. 7, No. 1, pp.76-92.

- Grove, D.B. (1977). **"The use of Galerkin finite-element methods to solve mass transport equations"**, U.S. geological survey, Water Resources Division, Denver federal center, Denver, Colorado.
- Guangyu Y. and Viraraghaven T. (2001). **"Heavy metal removal in biosorption Column by immobilized M.rouxii biomass"**, Biores. Technol. Vol. 78. pp. 243-249.
- He M., Wang .Z and Tams H. (1996). **"The chemical, toxicological and ecological studies in assessing the heavy metal pollution in LeAn river"**, China. Water research, Vol.32, No.2 .pp.510–518.
- Herbert J.R.B. (1994). **"Metal transport in groundwater contaminated by acid mine drainage"**, Nordic Hydrology, Vol.25, pp.193-212.
- Hinkelmann R. (2005). **"Efficient Numerical Methods and Information-Processing Techniques in Environment Water"**, Stuttgart, Springer, 312p.
- Jenning A.A., Kirkner D.J. and Theis T.L. (1982). **"Multicomponent equilibrium chemistry in groundwater quality model"**, Water Resource Research, Vol. 18, No. 4, pp.1089-1096.
- Kachiashvili K., Gordeziani D., Lazarov R. and Melikdzhaian D. (2007). **"Modeling and simulation of pollutants transport in rivers"**, Applied Mathematical Modelling, Vol. 31, pp. 1371-1396.
- Kaden S. (1985). **"Sub-models of water quality for the analysis of regional water policies in open-pit Lignite mining area"**, Mine Water, Vol. 2, pp. 673-684.
- Kaden, S. and Luckner L. (1984). **"Groundwater management in open-pit lignite mining area"**, International Symposium, Montreal, Canada, May 21-23, Proc. Vol. I, pp. 69-78.
- Klaus A.H. and Steve T.C. (1993). **"Computational Fluid Dynamics for Engineers"**, 2nd Edition, 425pp.
- LaGrega, M.D., Buckingham P.L. and Evans, J.C. (1994). **Hazardous waste management**, McGraw-Hill, Inc., USA, 1146p.
- Lee Y. and Park H. (1994). **"Parameterization of the Pollutant Transport in Urban Street Canyons, Atmospheric Environmental"**, Vol. 28, pp. 2343-2349.
- Macklin M. (1992). **"Metal pollution of soils and sediment in M.D.Newson"**, Managing the human impact on the natural environment: Patterns and Processes, London: Belhaven Press. pp. 172–195.
- Marino M.A. (1974). **"Distribution of contaminants in porous media flow"**, Water Resources Research, Vol. 10, No. 5, pp. 1013-1018.
- National Coal Board. (1982). **"Technical Management of water in the Coal Mining Industry"**, the national coal board, London, 129p.

- Neihad A.K., (2003). "**Computational fluid dynamics simulation of turbulent flows and pollutant dispersion around groups of buildings**", Vipac Engineers & Scientists Unit E1-B Centre court, NSW 2113.
- Patankar, S.V. (1985). "**Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**", CRC press, 197 pp.
- Pepper D.W. and Stephenson D.E. (1995). "**An adaptive finite-element model for calculating subsurface transport of contaminant**", Ground Water, Vol. 33, No. 3, P. 486-497.
- Pickens J.F. and Lennox W.C. (1976). "**Numerical simulation of waste movement in steady groundwater flow systems**", Water Resources Research, Vol. 12, No. 2, pp.171-180.
- Pinder G.F. and Frind, E.O. (1972). "**Application of Galerkin's procedure to aquifer analysis**", Water Resources Research, Vol. 8, No. 1, pp.108-120.
- Pinder, G.F. (1973). "**A Galerkin finite-element simulation of groundwater contamination on Long Island New York**", Water Resources Research, Vol. 9, No. 6, pp. 1657- 1669.
- Putti, M., Yen, W.W.G. and mulder, W.A. (1990). "**A triangular finite volume approach with high-resolution upwind terms for the solution of groundwater transport equations**", Water Resources Research, Vol. 26, No 12, pp. 2865-2880.
- Rabbani M.G. and Warner J.W. (1994). "**Shortcoming of existing finite element formulations for subsurface water pollution modeling and its rectification: One-Dimensional case**", Siam Journal on Applied Mathematics, A publication of the society for Industrial and Applied Mathematics, Vol. 54, No. 3, pp. 660-673.
- Raghavana K.V, Jegana J., Palanivelub K., Velan M. (2004). "**Removal of nickel (II) ions from aqueous solution using crab shell particle a packed bed up-flow column**", Hazardous Materials. Vol. 113, pp. 223-230.
- Ramovski R. and Sciban M. (2007). "**Biosorption of Cr(IV) and Cu(II) by waste tea fungal biomass**", Ecological Engineering, Vol. 34, No. 2, 179-186.
- Reddi L.N. and Inyang H.I. (2000). "**Geoenvironmental Engineering, principles and applications**", Marcel Dekker, Inc., New York, 494p.
- Rubio R.F. and Lorca D.F. (1993). "**Mine water drainage**", Mine Water and the Environment, Vol. 12, pp. 107- 130.
- Scanlon T. (1998). "**A numerical analysis of flow and dispersion around a cube**", University of Strathclyde Publication, Scotland, pp. 1-9.
- Schintu M. (1991). "**Heavy metal distribution and mobilization in sediment from a drinking water reservoir near a mining area**", Water, Air and Soil Pollution, Vol.12, pp. 271-285.

- Sheng D. and Smithe D.W. (1997). "**Analytic solutions to the advective contaminant transport equation with non-linear sorption**", Research Report, Vol.12, No.158.
- Singer, P.C. and Stumm W. (1970). "**Acidic Mine Drainage: The rate determining step**", Science, Vol. 167, pp. 1121-1123.
- Singh M. Muller G. and Singh I.B. (2003). "**Geogenic distribution and baselin concentration of heavy metal in sediment on the Gonges River, India**", Geochemical Exploration, Vol. 80, pp. 1-17.
- Svensson U. (1997). "**Modeling ground- water flow on a regional scale**", The PHONICS Journal: Computational fluid Dynamics and Its Applications, Vol. 10, No. 4, pp. 442-450.
- Tang D.H. and Pinder G.F. (1979). "**Analysis of mass transport with uncertain physical parameters**", Water Resources Research, Vol. 15, No. 5, pp. 1147-1155.
- Vegilo F.A., Esposito A. and Reverberi A.P. (2003). "**Standardization of heavy metal biosorption test: equilibrium and modeling study**", Process Biochem. Vol.38, pp.953-961.
- Versteeg H.K. and W. Malasekera. (1995). "**An introduction to computational fluid dynamics the finite volume method**", Vol. 5, No. 1, 257p.
- Volesky B. (1990). "**Biosorption of heavy metals**", CRC Press, Florida.
- Wang H.F. and Anderson M.P. (1982). "**Introduction to groundwater modeling, finite difference and finite element methods**", W.H. Freeman and Company, San Francisco, 237p.
- Williams R.E. (1975). "**Waste production and disposal in mining and Metallurgical industries**", Miller-Freeman Publishing Company, San Francisco, California, 489p.
- Williams R.E., Baldwin, J. and Ralston, D.R. (1979). "**Coping with mine drainage regulations**", Proceeding of the First International Mine Drainage Symposium, Denver, Colorado, pp.184-218.
- Xavier R.N. (1990). "**Environmental-biochemical aspect of heavy metals in acid mine water**", International Symposium on acid water in Pyritic Environment, Lisbon.
- Zhi-Qiang D. and Hoon-Shin J. (2009). "**Scaling dispersion model for pollutant transport in rivers**", Environmental Modelling & Software, Vol. 24, pp. 627-631.

## **Abstract**

Acid mine drainage (AMD) can be considered as the worst environmental problem related to the mining industry. Sarcheshmeh is considered to be a major porphyry copper mine in Iran resulted many environmental problems. Numerical methods are routinely used as an appropriate tool to solve such problems. Finite volume is a proper numerical method for the simulation of heat and mass transport problems. This study aims to model transport of metallic pollutants in Shour River from Sarcheshmeh porphyry copper mine. PHOENICS software was used for this purpose. In this way, calibration process of finite volume model was performed by considering two separate problems. The first problem deals with the modeling of metal transport in a hypothetical river and the second one considers modeling of the biosorption of copper and manganese from acid mine drainage in a continuous reactor. After calibration, transportation of metallic pollutants associated with acid mine drainage in Shour river was modeled taking the mass transport mechanisms into account. The results show that the adsorption is the main mechanism for metal removal from river water. Moreover, this process follows the Langmuir non-linear isotherm. A better agreement was achieved between the field data and model predictions when ferrous iron oxidation and hydrolysis of ferric iron processes were considered. The results obtained from this study can be used for developing an environmental management program in order to monitor surface water pollution problems and to have a better understanding of the pollution transport mechanisms.

**Key words:** Acid mine drainage, numerical modeling, finite volume, adsorption, pollutant transport, Sarcheshmeh copper mine



**Shahrood University of Technology**  
Faculty of Mining, Petroleum and Geophysics  
M.Sc.thesis

**Application of computational fluid dynamics in  
modeling of the fate and transport of metallic  
pollutants associated with acid mine drainage  
at Sarcheshmeh porphyry copper mine**

By:  
**K. Seif Panahi Shabani**

Supervisors:  
Dr. F. Doulati

Advisors:  
Dr. M. Ansari Jafari

**September 2010**