

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِیْمِ



دانشکده کشاورزی

بخش مهندسی آب

پایان نامه تحصیلی برای دریافت درجه کارشناسی ارشد رشته مهندسی کشاورزی
گرایش سازه های آبی

بر آورد پارامترهای مدل ناحیه ماندابی (TSM) در رودخانه ها با استفاده از روش بهینه
سازی تکامل رقابتی جوامع (SCE)

مؤلف:

مصطفی فتاحی

اساتید راهنما:

دکتر محمد مهدی احمدی

دکتر کورش قادری

استاد مشاور:

دکتر مجید رحیم پور

زمستان ۱۳۹۳



این پایان نامه به عنوان یکی از شرایط درجه کارشناسی ارشد به

بخش مهندسی آب

دانشکده کشاورزی

دانشگاه شهید باهنر کرمان

تسلیم شده است و هیچگونه مدرکی به عنوان فراغت از تحصیل دوره مزبور شناخته نمی شود.

دانشجو: مصطفی فتاحی

استاد راهنما ۱: دکتر محمد مهدی احمدی

استاد راهنما ۲: دکتر کورش قادری

استاد مشاور: دکتر مجید رحیم پور

دور ۱: دکتر غلامعباس بارانی

دور ۲: دکتر بهرام بختیاری

نماینده تحصیلات تکمیلی در جلسه دفاع: دکتر حمیدرضا اخوان

معاونت پژوهشی و تحصیلات تکمیلی دانشکده: دکتر مجید رحیم پور

حق چاپ محفوظ و مخصوص به دانشگاه شهید باهنر کرمان است

به نام مادر،

بوسه ای باید زد دست‌هایی را

که می شویند غبار خستگی روزگار را

و سیراب می کنند روح تشنه را

به نام پدر،

بوسه ای باید زد دست‌هایی را

که می تابانند نیرو را

و محکم می کنند استواری پایه‌های زیستن را...

"تقدیم به پدر و مادر عزیزم"

و تقدیم به:

همسر مهربانم

تشکر و قدردانی:

به نام یاری گر بی پناهان، خدای بی همتا

پروردگارا مرا مدد کن تا دانش اندکم، نه نردبانی باشد برای فزونی تکبر و غرور، نه حلقه‌ای برای اسارت و نه دستمایه‌ای برای تجارت، بلکه تکیه گاهی باشد برای تجلیل از تو و متعالی ساختن خود و دیگران. خداوندا تو را سپاس می‌گویم که در لحظه لحظه زندگانی یاورم بودی، از دریچه‌ی لطف خود بر من منت نهاده و وجود تشنه‌ام را جرعه‌ای از علم و معرفت حیات بخشیدی.

در ابتدا بر خود لازم می‌دانم از زحمات و کمک‌های فراوان اساتید گرامی **آقای دکتر محمد مهدی احمدی و آقای دکتر کورش قادری** کمال تشکر و قدر دانی را داشته باشم. توصیه‌های پدران و اشارات علمی و دقیق ایشان تأثیر انکار ناپذیری در به نتیجه رسیدن این پایان نامه داشته است. از استاد عزیز **آقای دکتر مجید رحیم پور** که مشاوره این تحقیق را به عهده گرفتند نهایت سپاس را دارم.

همچنین از داوران محترم **آقای دکتر غلامعباس بارانی و آقای دکتر بهرام بختیاری** که زحمت داوری این پایان‌نامه را تقبل نمودند، بسیار متشکرم. از اساتید بزرگوار بخش آب نیز کمال سپاسگزاری را دارم.

برای همه این عزیزان از درگاه حق تعالی عزت و سربلندی را آرزو مندم.

چکیده

معادله حاکم بر انتقال آلودگی در رودخانه ها معادله انتقال پخش است؛ که یک معادله دیفرانسیل با مشتقات جزئی می باشد. در جریانهای طبیعی مناطقی به دلیل هندسه ی پیچیده، پیچ و خمها، پوشش گیاهی و مواد رسوبی اطراف رودخانه، بوجود می آیند که ناحیه ماندابی نامیده می شوند. در صورت وجود این مناطق معادله انتقال پخش کلاسیک نمی تواند به درستی برای شبیه سازی انتقال آلاینده به کار گرفته شود. وجود این ناهمگونی ها انتشار آلاینده ها را تحت تاثیر قرار می دهد؛ زمانی که آلاینده ای به درون جریان راه می یابد برای مدت زمانی در این مناطق ماندابی به دام می افتد و طی تبدیلی که با ناحیه اصلی جریان دارند دوباره به ناحیه اصلی جریان باز می گردند. برای شبیه سازی و مدلسازی انتقال پخش در رودخانه ها با ناحیه ماندابی سه مدل (TSM^1 , $FRADM^2$, $MADE^3$) ارائه شده است. مدل ناحیه ماندابی (TSM) مدل موثر و قابل اعتمادی است که اثرات ناحیه ماندابی را لحاظ می نماید. برای به کار بردن صحیح مدل ناحیه ماندابی سه پارامتر کلیدی آن یعنی ضریب پخش طولی در ناحیه آزاد جریان (K_f)، زمان ماندگاری آلاینده در ناحیه ماندابی (T) و نسبت سطح ناحیه ماندابی به سطح مقطع کل جریان (ϵ)، باید مشخص باشند. این پارامترها را می توان از طریق آزمایشات مسیر یابی یا از معادلات تجربی و روشهای بهینه سازی، برآورد نمود. به دلیل هزینه بر بودن آزمایشات مسیر یابی، محققین معادلات تجربی و روشهای بهینه سازی را برای برآورد این پارامترها ارائه نمودند. در این تحقیق با به کار گیری روش بهینه سازی تکامل رقابتی جوامع (SCE)، معادلاتی برای برآورد سه پارامتر کلیدی مدل ناحیه ماندابی استخراج شده است. این معادلات با استفاده از داده های هیدرولیکی و هندسی ۵۸ شاخه از رودخانه های مختلف، در قالب حداقل سازی خطای مجموع مربعات باقی مانده (SSQ) بین مقادیر اندازه گیری شده و برآورد شده محاسبه شده اند. در نهایت معادلات ارائه شده با معادلات تجربی موجود و داده های مشاهداتی مقایسه شد. نتایج نشان داد که معادلات ارائه شده، مقادیر اندازه گیری شده پارامترهای مدل ناحیه ماندابی را با کمترین خطای جذر میانگین مربعات ($RMSE$) برآورد نموده اند و کارایی و دقت معادلات ارائه شده به اثبات رسید.

واژه های کلیدی: رودخانه، انتقال پخش، مدل ناحیه ماندابی (TSM)، برآورد پارامترهای مدل ناحیه ماندابی، بهینه سازی، روش تکامل رقابتی جوامع (SCE)

¹ Modified advection dispersion equation

² Fractional advection dispersion equation

³ Transient storage model

فهرست مطالب

صفحه

عنوان

فصل اول: مقدمه

- ۱-۱- مقدمه ۲
- ۲-۱- ضرورت انجام تحقیق ۳
- ۳-۱- اهداف پژوهش ۳
- ۴-۱- شرح مطالب ارائه شده در این پایان نامه ۴

فصل دوم: کلیات و مروری بر منابع

- ۱-۲- مقدمه ۶
- ۲-۲- پخشیدگی ۷
- ۳-۲- پراکندگی طولی ۷
- ۴-۲- استخراج معادله انتقال پخش ۸
- ۱-۴-۲- پخش ۸
- ۲-۴-۲- انتقال پخش ۹
- ۵-۲- طبق بندی ریاضی معادلات دیفرانسیل جزئی ۱۰
- ۶-۲- روشهای حل معادلات دیفرانسیل جزئی ۱۱
- ۱-۶-۲- روشهای عددی ۱۲
- ۲-۶-۲- روشهای تحلیلی ۱۲
- ۱-۲-۶-۲- حل تحلیلی معادله پخش ۱۲
- ۲-۲-۶-۲- حل تحلیلی معادله انتقال پخش ۱۴
- ۷-۲- مدل های ارائه شده برای نواحی ماندابی ۱۶
- ۱-۷-۲- مدل انتقال پخش اصلاح شده (MADE) ۱۹
- ۲-۷-۲- مدل کسری انتقال پخش (FRADE) ۱۹
- ۳-۷-۲- مدل ناحیه ماندابی (TSM) ۲۰
- ۱-۳-۷-۲- حل عددی TSM ۲۱
- ۲-۳-۷-۲- حل تحلیلی TSM ۲۱

- ۲۳-۸-۲ برآورد پارامترهای مدل ناحیه ماندابی..... ۲۳
- ۲۳-۸-۲-۱- معادلات تجربی ارائه شده ۲۳
- ۲۴-۸-۲-۲- روشهای بهینه سازی برای برآورد پارامترهای مدل ناحیه ماندابی ۲۴
- ۲۶-۹-۲- روشهای بهینه سازی ۲۶
- ۲۷-۹-۲-۱- روشهای بهینه سازی سراسری ۲۷
- ۲۸-۹-۲-۲- سابقه تحقیق از تکامل رقابتی جوامع (SCE) ۲۸
- ۳۰-۱۰-۲- نتیجه گیری ۳۰

فصل سوم: مواد و روش ها

- ۳۲-۱-۳- مقدمه ۳۲
- ۳۲-۲-۳- آنالیز ابعادی ۳۲
- ۳۵-۳-۳- روش بهینه سازی سراسری تکامل رقابتی جوامع (SCE) ۳۵
- ۳۶-۱-۳-۳- الگوریتم SCE ۳۶
- ۳۸-۲-۳-۳- الگوریتم CCE ۳۸
- ۴۱-۳-۳-۳- انتخاب پارامترهای الگوریتم ۴۱
- ۴۳-۴-۳- داده های مورد استفاده ۴۳
- ۴۷-۵-۳- تابع هدف ۴۷
- ۴۷-۶-۳- شاخص های آماری ارزیابی ۴۷
- ۴۸-۷-۳- اعتبار سنجی مدل توسعه داده شده ۴۸
- ۵۰-۸-۳- الگوریتم کلی از روش به کار گرفته شده ۵۰

فصل چهارم: نتایج و بحث

- ۵۲-۱-۴- بررسی صحت کد SCE ۵۲
- ۵۲-۲-۴- مقادیر ضرائب معادلات به دست آمده ۵۲
- ۵۳-۳-۴- بررسی دقت معادلات به دست آمده ۵۳
- ۵۸-۴-۴- شاخص های آماری ۵۸
- ۶۰-۱-۴-۴- پارامتر ضریب پخش طولی (K_f) ۶۰
- ۶۰-۲-۴-۴- پارامتر زمان ماندگاری آلاینده در ناحیه ماندابی (T) ۶۰

۳-۴-۴- پارامتر نسبت سطح مقطع ناحیه ماندابی به کل جریان (E) ۶۱

فصل پنجم: نتیجه گیری و پیشنهادات

۱-۵- نتیجه گیری ۶۳

۲-۵- پیشنهادات ۶۴

منابع مورد استفاده ۶۵

فهرست جدول ها

صفحه

- جدول (۱-۲): طبقه بندی ریاضی معادله دیفرانسیل جزئی ۱۱
- جدول (۱-۳): داده های مورد استفاده ۴۴
- جدول (۲-۳): توابع استاندارد ۴۸
- جدول (۱-۴): ضرائب بهینه شده پارامترهای مدل ناحیه ماندابی ۵۳
- جدول (۲-۴): مقادیر ماکزیمم و مینیمم پارامترهای اندازه گیری شده و برآور شده ۵۴
- جدول (۳-۴): شاخص های آماری بین مقادیر اندازه گیری شده و برآورد شده ۵۹

فهرست شکل ها

صفحه

- شکل (۱-۲): انتشار ناشی از تزریق آنی آلاینده ۱۳
- شکل (۲-۲): پراکندگی آلاینده با تزریق پیوسته ۱۴
- شکل (۳-۲): انتقال آلاینده در اثر سرعت سیال و پخش مولکولی ۱۵
- شکل (۴-۲): تاثیر فرم بستر در بوجود آمدن ناحیه ماندابی ۱۷
- شکل (۵-۲): نواحی ماندابی در بستر و سواحل رودخانه ۱۸
- شکل (۱۱-الف): بی تاثیر بودن عدد فرود روی پارامترهای بدون بعد ناحیه ماندابی ۳۳
- شکل (۱-۳-ب): بی تاثیر بودن عدد رینولدز روی پارامترهای بدون بعد ناحیه ماندابی ۳۴
- شکل (۲-۳): فلوجارت الگوریتم SCE ۳۷
- شکل (۳-۳): فلوجارت الگوریتم CCE ۴۰
- شکل (۴-۳): فلوجارت کلی از روش به کار گرفته شده در این تحقیق ۵۰
- شکل (۱-۴-الف): مقادیر اندازه گیری شده و برآورد شده K_f توسط روش SCE ۵۵
- شکل (۱-۴-ب): مقادیر اندازه گیری شده و برآورد شده T توسط روش SCE ۵۵
- شکل (۱-۴-ت): مقادیر اندازه گیری شده و برآورد شده E توسط روش SCE ۵۶
- شکل (۲-۴-الف): مقادیر اندازه گیری شده و برآورد شده K_f توسط روشهای مختلف ۵۷
- شکل (۲-۴-ب): مقادیر اندازه گیری شده و برآورد شده T توسط روشهای مختلف ۵۷
- شکل (۲-۴-ت): مقادیر اندازه گیری شده و برآورد شده E توسط روشهای مختلف ۵۸

فصل اول

مقدمه

۱-۱- مقدمه

روند رو به رشد آلودگی آب های سطحی توسط پساب های کشاورزی و فاضلاب های صنعتی که به صورت کنترل نشده به رودخانه ریخته می شود، یکی از مشکلات مناطقی است که صنایع بزرگ در نزدیکی رودخانه ها قرار گرفته و رودخانه منبع تامین کننده آب آنها است. توانایی شبیه سازی و تخمین جریان، انتقال آلودگی و رسوب در سیستم های رودخانه ای برای مدیریت منابع آب و مهندسی محیط زیست اهمیت زیادی دارد. استفاده از فرآیند پخشیدگی و تقویت قدرت خودپالایی رودخانه ها یکی از مهمترین روش های مدیریت زیستی رودخانه محسوب می شود. این قابلیت موجب کاهش خطر خسارت به محیط زیست در آینده و تاثیر مهندسی محیط زیست بر مدیریت منابع آب می شود. سرازیر شدن انواع پساب های کشاورزی و صنعتی به منظور اکسیداسیون و حذف مواد آلی، به یک عمل مرسوم تبدیل شده است. برای کنترل آلودگی در جریان روباز، رها سازی آلاینده ها باید به صورت منطقی و تنظیم شده انجام شود. این موضوع نیازمند اطلاع دقیق از توانایی حمل، پخش و پاکسازی آلودگی توسط جریان آب در طول مشخصی از مسیر خود است (ایزدی نیا و کوپائی، ۱۳۸۹).

مطالعه روی کیفیت آبهای سطحی از اهمیت ویژه ای برخوردار است و این موضوع وقتی که منبع تهیه آب آشامیدنی انسان ها و آب لازم برای صنایع از رودخانه ها تامین می شود، نیاز به توجه بیشتری دارد. اگر مکانیسم انتقال و پخش آلودگی در رودخانه ها با مرز های هندسی مختلف مشخص شده باشد می توان برای کاهش اثرات آلودگی بر سلامت عموم جامعه انسانها با اختلاط آبها و تقویت قدرت خود پالایندگی رودخانه ها برنامه ریزی نمود. هنگامی که یک منبع آلودگی به داخل آب رها می شود به علت حرکت مولکولی و تلاطم و غیر یکنواختی سرعت در سطح مقطع جریان، سریعاً در آب پخش و همراه جریان آب جابجا می شود. مکانیسم پخش و حرکت آلاینده ها در آب بخش مهمی از دانش محیط زیست است که تاکنون پژوهش های زیادی در موضوع های مرتبط با آن صورت گرفته است. تخمین و انتشار آلودگی در رودخانه ها به دو دسته کلی آزمایشگاهی و تئوری تقسیم می شوند. در هر دو روش نیازمند توسعه مدل برای پیش بینی رفتار پدیده انتقال و انتشار آلودگی در رودخانه ها می باشد (پارسایی و

همکاران، ۱۳۹۰).

۱-۲- ضرورت انجام تحقیق

با توجه به اهمیت مطالعه روی کیفیت آب رودخانه ها و در ارتباط بودن مستقیم مشکلات ناشی از انتشار آلودگی در آبراهه ها و رودخانه ها بر سلامت جامعه انسانی و محیط زیست، نیاز به مدلسازی مکانیزم انتقال آلودگی در جریان رودخانه ها بسیار ضروری به نظر می رسد. معادله حاکم بر انتشار آلودگی در آبراهه ها معادله انتقال پخش (ADE) کلاسیک می باشد؛ همچنین این معادله برای مدلسازی انتقال رسوب معلق در رودخانه ها به کار گرفته می شود. پیچیده بودن هندسه جریان تاثیر بسیار مهمی روی نحوه انتقال آلودگی دارد. با توجه به مطالعاتی که قبلا روی کیفیت آب رودخانه ها صورت گرفته است؛ در نظر گرفتن تاثیر عوامل هندسی سطح مقطع جریان مانند ناحیه ماندابی روی مکانیزم انتشار آلودگی بسیار مهم می باشد. برای مدلسازی انتشار آلودگی در رودخانه ها با ناحیه ماندابی نیاز است که معادله کلاسیک انتقال پخش را اصلاح شود. یکی از مدل های قابل اعتماد برای شبیه سازی انتقال آلاینده در جریانهایی با ناحیه ماندابی، مدل ناحیه ماندابی (TSM) می باشد که برای به کار گیری مدل ناحیه ماندابی لازم است پارامترهای کلیدی این مدل را برآورد شود.

۱-۳- اهداف پژوهش

در این پایان نامه با به کار گیری روش بهینه سازی سراسری SCE با استفاده از داده های هیدرولیکی و هندسی رودخانه ها معادلاتی برای برآورد پارامترهای مدل ناحیه ماندابی ارائه شده است. این معادلات زمانی که برخی از مشخصات هیدرولیکی و هندسی رودخانه ها در دسترس هستند قابل کاربرد می باشند. می توان با استفاده از آنها پارامترهای مدل ناحیه ماندابی به طور قابل قبولی برآورد شوند. در این کار سعی شده معادلاتی ارائه شوند که از معادلات تجربی موجود کاراتر و موثر تر باشند و کارایی آنها با توجه به شاخص های آماری نسبت به معادلات تجربی موجود ملموس باشد.

۱-۴- شرح مطالب ارائه شده در پایان نامه

در فصل دوم ابتدا کلیاتی راجع به معادلات انتقال و پخش ارائه شده سپس به بررسی مدل‌های ناحیه ماندابی و روشهای حل آنها پرداخته شده است. پس از تشریح مدل ناحیه ماندابی پارامترهای کلیدی آن شرح داده شده اند و مروری بر روشهای ارائه شده برای برآورد پارامترهای مدل ناحیه ماندابی صورت گرفته است. در فصل سوم پس از بررسی آنالیز ابعادی پارامترهای مدل ناحیه ماندابی، نحوه توسعه کد الگوریتم SCE در نرم افزار متلب برای برآورد پارامترهای مدل ناحیه ماندابی شرح داده شده است و مراحل الگوریتم SCE مورد بررسی قرار گرفته است. در فصل چهارم معادلات استخراج شده برای برآورد پارامترهای مدل ناحیه ماندابی ارائه شده است و کارایی معادلات ارائه شده با استفاده از شاخص های آماری با معادلات موجود و داده های اندازه گیری شده، مقایسه شده است. نهایتاً در فصل پنجم نتیجه گیری از انجام این تحقیق ارائه شده است.

فصل دوم

کلیات

و

مروری بر پژوهش های پیشین

مسائل آلودگی های محیطی، در رودخانه ها، سواحل و هوا را می توان با استفاده از مدل های ریاضی تحلیل کرد. در این نوع مسائل مجهول C (غلظت ماده آلوده کننده) یک کمیت عددی فیزیکی است که همان جرم ماده آلاینده است که می تواند شوری و یا درجه حرارت آب و ... باشد. در حل مسائل مربوط به آلودگی این موضوع باید مشخص شود که کمیت ماده آلوده کننده پایدار^۱ است یا ناپایدار^۲. در صورتی که ماده آلوده کننده پایدار نباشد در اثر فرآیند های بیولوژیکی یا شیمیایی مداوماً از بین می رود. از کمیت های ناپایدار می توان به تعداد باکتری ها در واحد حجم آب اشاره نمود که در شرایط خاص به صورت تابع نمایی نسبت به زمان از بین می روند. اصل بقا جرم در مورد کمیت پایدار است که می تواند در آب به صورت محلول^۳ یا به صورت معلق^۴ باشد (شمسی، ۱۳۷۹).

معادله حاکم بر انتقال آلودگی در رودخانه ها معادله انتقال پخش است که معادله دیفرانسیل با مشتقات جزئی می باشد. به دلیل اینکه معادله انتقال پخش اثرات ناحیه ماندابی را لحاظ نمی کند، نمی تواند مدل سازی و شبیه سازی جریان در مجاری باز را به درستی انجام دهد از اینرو محققین معادلات مختلفی را برای انتقال پخش با در نظر گرفتن ناحیه ماندابی ارائه نمودند. در این فصل ابتدا کلیاتی راجع به انتقال پخش ارائه شده است سپس معادلات انتقال پخش با در نظر گرفتن نواحی ماندابی ذکر شده اند. سپس به معرفی روش های بهینه سازی پرداخته شده و برخی از کاربردهای روش های بهینه سازی در برآورد پارامترهای ناحیه ماندابی ارائه شده است.

¹ Conservative

² Non conservative

³ Diluted

⁴ Suspended

۲-۲- پخشیدگی

اگر یک ماده قابل حل (یا مخلوط) در درون آب به طور یکنواخت توزیع نشده باشد یک شیب غلظت از این ماده برقرار می‌شود و ماده مخلوط شده از نقطه ای با شیب غلظت بیشتر به محلی که شیب غلظت کمتر است انتقال می‌یابد؛ این انتقال در اثر حرکت مولکول‌ها و برخوردشان با یکدیگر است. این پدیده را پخشیدگی می‌نامند. نتیجه نهایی پخشیدگی آن است که توزیع فضایی و سه بعدی ماده مخلوط شده در یک محیط مرکب از این ماده و سیال تا حد ممکن یکنواخت می‌گردد. می‌توان فرآیند پخشیدگی را به دو نوع پخشیدگی مولکولی (Molecular Diffusion) و متلاطم (Turbulent Diffusion) تقسیم نمود (پارسائی، ۱۳۹۱).

۲-۳- پراکندگی طولی

جریان یکنواخت (بدون شیب سرعت) و متلاطم را در کانال و از چپ به راست نظر بگیرید در این حالت ماده ردیاب پس از تزریق لحظه ای در $x = 0$ تحت تأثیر یک حرکت با سرعت یکنواخت و نیز فرآیند پخشیدگی قرار می‌گیرد. نظر به اینکه جریان متلاطم است شدت تلاطم توانایی سیال را در انتشار ماده ردیاب خیلی بیشتر می‌کند. در این حالت فرآیند پخشیدگی، بخشی به فعالیت مولکولی و بخشی هم به حرکت درهم و برهم گردابه‌های متلاطم مربوط می‌شود این بدان معنی است که انتشار ماده ردیاب نتیجه تأثیر دو فرآیند پخشیدگی مولکولی و پخشیدگی متلاطم است. باید دانست که این دو پخشیدگی از معادلات یکسانی پیروی می‌کنند و به علت این که بزرگی و قدرت پخشیدگی متلاطم چندین بار از پخشیدگی مولکولی بیشتر است. در تحلیل جریان‌های متلاطم از پخشیدگی مولکولی صرف نظر می‌شود. اگر یک جریان متلاطم با شیب سرعت از چپ به راست برقرار در یک آبراهه برقرار باشد. در این حالت ماده ردیاب پس از تزریق در $x = 0$ تحت تأثیر سرعت‌های متفاوت در امتداد عمق (سرعت از کف تا سطح آب در امتداد عمق تغییر می‌کند) قرار می‌گیرد. همچنین به دلیل پخشیدگی متلاطم اختلاط جانبی نیز صورت می‌گیرد؛ نتیجه ترکیب این دو فرآیند (پخشیدگی متلاطم و جریان با گرادیان سرعت) یک انتشار خیلی بزرگ‌تر در جهت طول است و سرانجام ماده ردیاب در سراسر عمق پخش می‌شود. بعد از

اختلاط کامل در سرتاسر مقطع جریان فقط انتشار در جهت طول دیده می‌شود. این پدیده به پراکندگی طولی موسوم است، در نتیجه جابجایی طولی انتقال جرم همراه با غیر یک نواختی توزیع سرعت در امتداد عمق است. در حقیقت فرآیند پراکندگی از عدم یکنواختی توزیع سرعت در امتداد عمق ناشی می‌شود. تیلور نشان داد که در جریان متلاطم فقط حدود یک در صد (۱٪) و یا کمتر از پراکندگی طولی را پراکندگی مولکولی تشکیل می‌دهد. در جریان‌های متلاطم مشارکت پخشیدگی مولکولی در مقایسه با پخشیدگی متلاطم ناچیز است و لذا از آن صرفه نظر می‌شود (پارسائی، ۱۳۹۱).

۲-۴- استخراج معادله انتقال پخش

۲-۴-۱- پخش

بر اساس قانون فیک^۱ (۱۸۵۵) تغییرات جرم حل شونده در محیط سیال بر اساس شیب منحنی غلظت حل شونده در حالت یک بعدی به صورت معادله (۲-۱) است:

$$\dot{m} = -D_m \frac{\partial C_m}{\partial x} \quad (1-2)$$

که \dot{m} تغییرات جرم حل شونده بر حسب $(kg \cdot m/s)$ ؛ D_m ضریب پخش مولکولی بر حسب (m^2/s) ؛ C_m غلظت ماده حل شونده بر حسب (kg/m^3) در مایع می‌باشد.

معادله (۲-۱) دلالت بر این دارد که جابجایی حل شونده از نقطه ای با غلظت بالا به سمت نقطه ای با غلظت پایین حل شونده است. طبق معادله پیوستگی^۲ (قانون بقای جرم) تغییرات جرم بر واحد سطح برابر است با نرخ تغییرات جرم بر واحد زمان:

$$\frac{\partial \dot{m}}{\partial x} + \frac{\partial C_m}{\partial t} = 0 \quad (2-2)$$

با جاگذاری معادله (۲-۱) در معادله (۲-۲) معادله پخش خالص در حالت یک بعدی به صورت زیر به

¹ Fick's law

² Continuity equation

دست می آید (چانسون، ۲۰۰۴):

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} = D_m \frac{\partial^2 C_m}{\partial x^2} \quad \text{الف (۳-۲)}$$

همچنین برای حالت سه بعدی از ترکیب معادلات (۱-۲) و (۲-۲) معادله پخش خالص برای حالت سه بعدی به صورت زیر می باشد:

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} = D_m \left(\frac{\partial^2 C_m}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_m}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_m}{\partial z^2} \right) \quad \text{ب (۳-۲)}$$

۲-۴-۲- انتقال پخش

برای استخراج معادله پخش با فرض ثابت بودن سیال و در نظر نگرفتن انتقال معادلات توسعه داده شدند. با در نظر گرفتن سرعت سیال تغییرات کل جرم حل شونده در سیال برابر است با:

$$\dot{m} = VC_m + \left(-D_m \frac{\partial C_m}{\partial x} \right) \quad \text{(۴-۲)}$$

که V سرعت سیال بر حسب (m/s) می باشد.

برای جریان یک بعدی معادله انتقال پخش به صورت زیر می باشد (چانسون، ۲۰۰۴):

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} + V \frac{\partial C_m}{\partial x} = D_m \frac{\partial^2 C_m}{\partial x^2} \quad \text{الف (۵-۲)}$$

انتقال (Advection): ترم دوم سمت چپ معادله فوق، که در واقع انتقال جرم ناشی از سرعت جریان می باشد.

پخش (Diffusion): ترم سوم سمت راست معادله فوق انتقال جرم ناشی از تفاوت غلظت و یا پخشیدگی می باشد. ترم اول سمت چپ معادله فوق در واقع تغییرات غلظت را در نقطه ای خاص در زمان نشان می دهد.

همچنین برای جریان سه بعدی معادله انتقال پخش به صورت زیر می باشد: