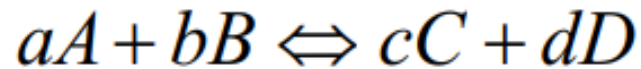


روش انجام آزمون	مقدار	واحد	فاکتور
Electrometric	۸/۳۲	—	pH
Closed Reflux-Titrimetric	۳۸۲۴۰	mg/lit	COD
Respirometric	۲۲۶۹۰	mg/lit	BOD <sub>5</sub>
Electrical Conductivity	۲۵۳۰۰	mg/lit	TDS
Electrical Conductivity	۳۹۵۰۰	μs/cm	EC
Gravimetric	۱۱۲۲۰	mg/lit	TSS
Spectrophotometric	۵۸۰	mg/lit	NO <sub>3</sub>
Spectrophotometric	۸۶۴	mg/lit	NH <sub>4</sub>
Spectrophotometric	۳۵۶	mg/lit	PO <sub>4</sub>
Spectrophotometric	۴۰	mg/lit	F <sup>-</sup>
Atomic Absorption	۰/۰۹	mg/lit	Cd
Atomic Absorption	۰/۱۷	mg/lit	Cu
Atomic Absorption	۳/۴۳	mg/lit	Fe
Atomic Absorption	۴۱/۹۹	μg/lit	Hg
Atomic Absorption	۰/۳۵	mg/lit	Mn
Atomic Absorption	۰/۶۶	mg/lit	Pb



# واکنش‌های شیمیایی

- حلالیت آلودگی‌ها در میزان آلودگی منابع آب زیرزمینی موثر هست.
- برای یک فرآیند شیمیایی ، غلظت اجزای واکنش دهنده و محصولات واکنش نقش یک نیروی محرک را برای کل روند واکنش بازی می کنند. برخی واکنش‌های شیمیایی تا حدی برگشت پذیر هستند ، به این معنی که آنها همزمان در هر دو جهت پیش می روند. در یک واکنش برگشت پذیر کلی ، ترکیبات A و B را برای تولید محصولات C و D در نظر بگیرید.



- که در آن a ، b ، c ، و d به ترتیب ضرایب مربوط به تعداد مول ترکیبات شیمیایی A ، B ، C و D هستند. تعیین فلش دو نشان می دهد که واکنش همزمان در هر دو جهت انجام می شود ، یعنی یک واکنش برگشت پذیر است.

**جذب مواد جامد:** دو نوع ارتباط بین فازهای آبی و جامد وجود دارد: (۱) تجمع مواد در

یک سطح جامد آب ، که به آن جذب گفته می شود و (۲) درهم آمیختگی مولکول های

املاح با مولکول های فاز جامد ، که اصطلاحاً جذب است. به عبارت دیگر ، جذب محلول

شدن یک ماده مایع در یک حلال جامد است. تشخیص این دو فرآیند معمولاً دشوار یا

حتی گاهی غیرممکن است. اصطلاح جذب را می توان برای هر دو فرآیند مورد استفاده

قرار داد.

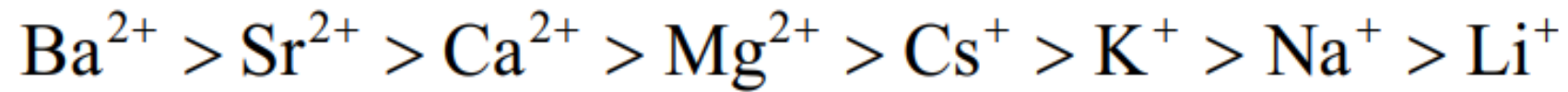
به طور کلی ، سه نوع جذب برای سیستم های آب زیرزمینی وجود دارد. در هر سه این نوع ، پیوندها بین سازنده و فاز جامد ایجاد می شوند. این انواع هستند:

• جذب فیزیکی: پیوندهای فیزیکی نسبتاً ضعیف ، مانند نیروهای ون در وال ، در این نوع ایجاد می شوند.

• جذب شیمیایی: تحت شرایط خاص ، پیوند شیمیایی ایجاد می شود بین املاح و سطح جامد است.

• تبادل یونی: تبادل یونی به دلیل اثر متقابل الکترواستاتیک بین ماده حل شده و یک سطح جامد اتفاق می افتد.

ترتیب انتخاب در مبادله یونی برای برخی از کاتیون های معمول است



# گسترش آلاینده‌ها در آب زیرزمینی

در مطالعات آلودگی آب های زیرزمینی ، باید تئوری ها و فرایندهای اساسی در پشت حرکت آلاینده ها درک شود. در منطقه زیر سطح ، فرایندهای پیچیده ای اتفاق می افتد که حرکت مواد را از طریق محیط متخلخل انجام می دهند. این فرایندها را می توان به صورت ریاضی بیان کرد.

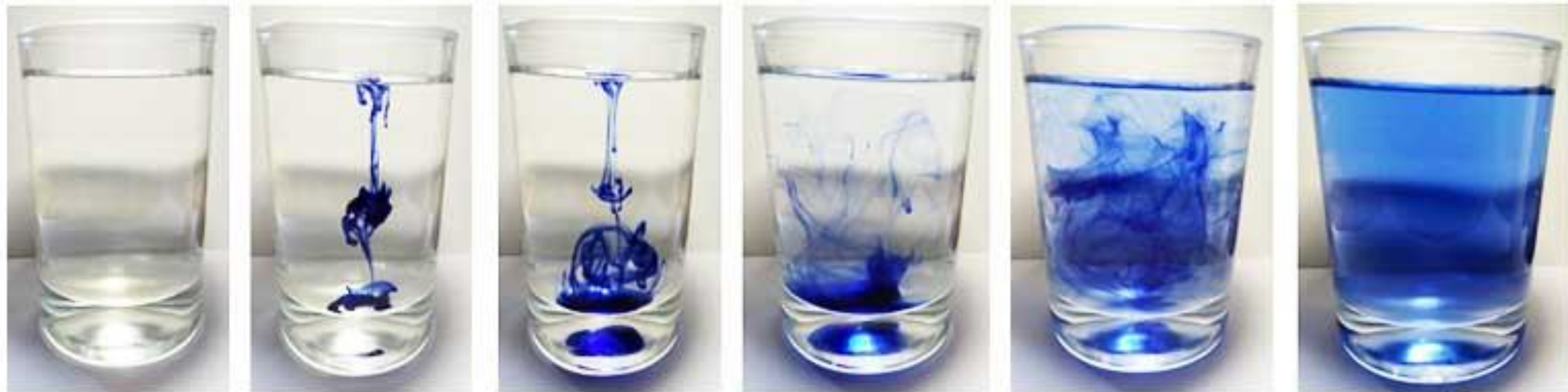


**انتشار (Diffusion)** یک انتقال خالص از مولکول ها از یک منطقه با غلظت بالاتر به یک غلظت کمتر با حرکت مولکولی تصادفی است.

حمل و نقل آلاینده ها با حرکت حجم زیادی از آب ، **انتقال (Advection)** نامیده می شود. سرعت حمل و نقل همان سرعت متوسط خطی آبهای زیرزمینی است.

**پراکندگی یا پخش (Dispersion)** به عبارت دیگر ، ممکن است بخشی از ستون آلاینده فضاهای بزرگ منفذی پیدا کند که بتواند به سرعت در آنها حرکت کند ، در حالی که بخشهای دیگر مجبورند از طریق فضای خالی محدودتر عبور کنند.

## DIFFUSION



*An Ink Drop Gradually Dissolves into a Glass of Water by DIFFUSION*

EASY BIOLOGY CLASS  
www.easybiologyclass.com



انتشار یک آلاینده از طریق آب در شرایط  $D_1$  توسط قوانین Fick شرح داده شده است. در شرایط حالت پایدار، اولین قانون Fick شار یک ماده محلول را به شرح زیر توصیف می کند:

$$F_{dif} = \frac{-DdC}{dx}$$

where:

$F_{dif}$  is the mass flux of the solute per unit area per unit time

$D$  is the diffusion coefficient (area/time)

$C$  is the solute concentration (mass/volume)

$dC/dx$  is the concentration gradient (mass/volume/distance).

### Diffusion Coefficients in Water for Certain Ions at 25°C

Cation	$D$ ( $10^{-6}$ cm <sup>2</sup> /s)	Anion	$D$ ( $10^{-6}$ cm <sup>2</sup> /s)
H <sup>+</sup>	93.1	OH <sup>-</sup>	52.7
Na <sup>+</sup>	13.3	F <sup>-</sup>	14.6
K <sup>+</sup>	19.6	Cl <sup>-</sup>	20.3
Rb <sup>+</sup>	20.6	Br <sup>-</sup>	20.1
Cs <sup>+</sup>	20.7	HS <sup>-</sup>	17.3
Mg <sup>2+</sup>	7.05	HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	11.8
Ca <sup>2+</sup>	7.93	CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	9.55
Sr <sup>2+</sup>	7.94	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	10.7
Ba <sup>2+</sup>	8.48	PO <sub>4</sub> <sup>3-</sup>	6.12
Ra <sup>2+</sup>	8.89		
Mn <sup>2+</sup>	6.88		
Fe <sup>2+</sup>	7.19		
Cr <sup>3+</sup>	5.94		
Fe <sup>3+</sup>	6.07		

---

A site has been contaminated by dieldrin. The porosity of the soil is 0.35 in this site. If the gradient of dieldrin concentration is 0.0003 mg/L/m, calculate the diffusive flux. The diffusion coefficient of dieldrin is  $4.74 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$ .

$$F_{dif} = nDdC/dx$$

$$= 0.35 \times 4.74 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s} \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{cm}^2 \times 0.0003 \text{ mg/L/m}$$

$$= 5.00 \times 10^{-16} \text{ mg/m}^2/\text{s} = 4.32 \times 10^{-11} \text{ mg/m}^2/\text{day}$$

حمل و نقل آلاینده ها با حرکت حجم زیادی از آب ، انتقال نامیده می شود. سرعت حمل و نقل همان سرعت متوسط خطی آبهای زیرزمینی است.

Assume that a bulk of dissolved contaminants reaches an unconfined aquifer that has a hydraulic conductivity of  $5 \times 10^{-5}$  m/s and a porosity of 0.4. If the hydraulic gradient in this aquifer is 0.08, how far might this contaminant move in 3 years?

Since it is assumed that the contaminant is being transported only by complete mixing, it has the same velocity as the groundwater. Therefore,

$$v = \frac{Ki}{n} = \frac{5 \times 10^{-5} \times 0.08}{0.4} = 1.0 \times 10^{-5} \text{ m/s}$$

$$= 10^{-5} \text{ m/s} \times 86,400 \text{ s/day} \times 365 \text{ day/year} = 31.54 \text{ m/year}$$

So, the distance that the contaminant moves in 3 years is:

$$d = 31.54 \text{ m/year} \times 3 \text{ years} = 94.62 \text{ m}$$

The 1D mass flux,  $F_x$ , due to advection can be calculated as:

$$F_x = v_x n C$$

where:

$v_x$  is the velocity of groundwater in  $x$  direction

$n$  is the porosity

$C$  is the concentration of dissolved contaminants.



A stream is being recharged by an unconfined aquifer which is 2.2 m thick and 98 m wide. The porosity of the aquifer is 0.23, and groundwater is flowing in this aquifer with the velocity of 0.3 m/day. Assuming that the concentration of nitrate is 22 mg/L in the groundwater, what is the mass flux of nitrate being discharged into the stream?

### SOLUTION

$$\begin{aligned}F_x &= v_x n C \\&= 0.3 \text{ m/day} \times 0.23 \times 22 \text{ mg/L} \times 0.001 \text{ g/mg} \times 1000 \text{ L/m}^3 \\&= 1.52 \text{ g/m}^2 \text{ - day}\end{aligned}$$

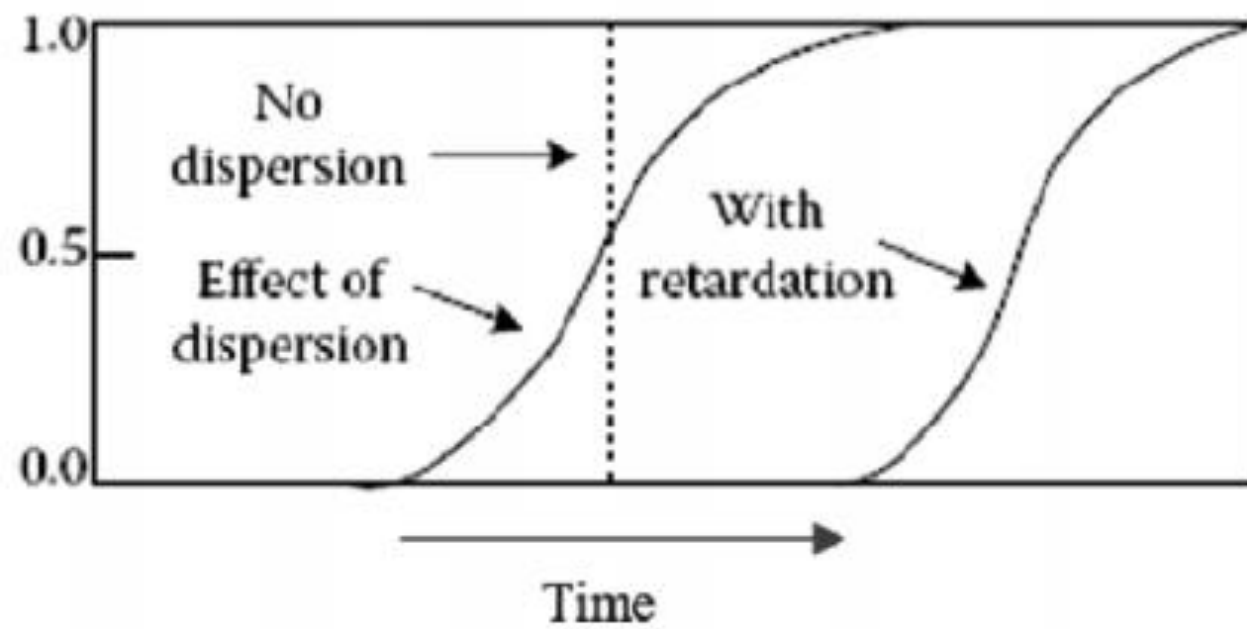
Therefore, the total flux discharged to the stream is:

$$\begin{aligned}F_T &= 1.52 \text{ g/m}^2 \text{ - day} \times 2.2 \text{ m} \times 98 \text{ m} \\&= 327.7 \text{ g/day}\end{aligned}$$

فرآیند دیگری که باعث می شود یک حجم آلاینده پخش شود، پراکندگی یا پخش است. یک حجم آلاینده در حین حرکت مسیرهای نامنظمی را دنبال می کند. به عبارت دیگر ، ممکن است بخشی از حجم آلاینده فضاهاى بزرگ منفذی پیدا کند که بتواند به سرعت در آن حرکت کند ، در حالی که بخشهای دیگر مجبورند از طریق فضای خالی محدودتر عبور کنند. بنابراین ، در سرعت یک حجم در حال پیشرفت که تمایل به پخش شدن ستون دارد ، اختلاف وجود خواهد داشت. بنابراین ، پراکندگی می تواند به عنوان رقت آلودگی ها به دلیل مخلوط شدن با آب غیر آلوده تعریف شود.

## Advection and Dispersion





For uniform flow fields, the mechanical dispersion is equal to the product of the dynamic dispersivity ( $\alpha_L$ ) and the average linear velocity:

$$D_m = \alpha_L \times v_i$$

where:

$D_m$  is the mechanical dispersion

$v_i$  is the linear velocity in the  $i$  direction.

Xu and Eckstein (1995) found a relationship between the apparent longitudinal dynamic dispersivity and flow length. This relationship is expressed as:

$$\alpha_L = 0.83(\log L)^{2.414}$$

where:

$\alpha_L$  is the apparent longitudinal dynamic dispersivity

$L$  is the length of the flow path.

Since molecular diffusion and mechanical dispersion usually take place coincidentally in groundwater movement, and they both tend to smear the edges of the plume, they are sometimes linked together and are simply referred to as *hydrodynamic dispersion*.

To take into account both the mechanical dispersion and diffusion, the coefficient of the hydrodynamic dispersion,  $D_L$ , is introduced. For a 1D flow, this coefficient can be represented as:

$$D_L = \alpha_L v_i + D^*$$

where:

$D_L$  is the longitudinal coefficient of the hydrodynamic dispersion

$\alpha_L$  is the dynamic dispersivity

$v_i$  is the average linear groundwater velocity

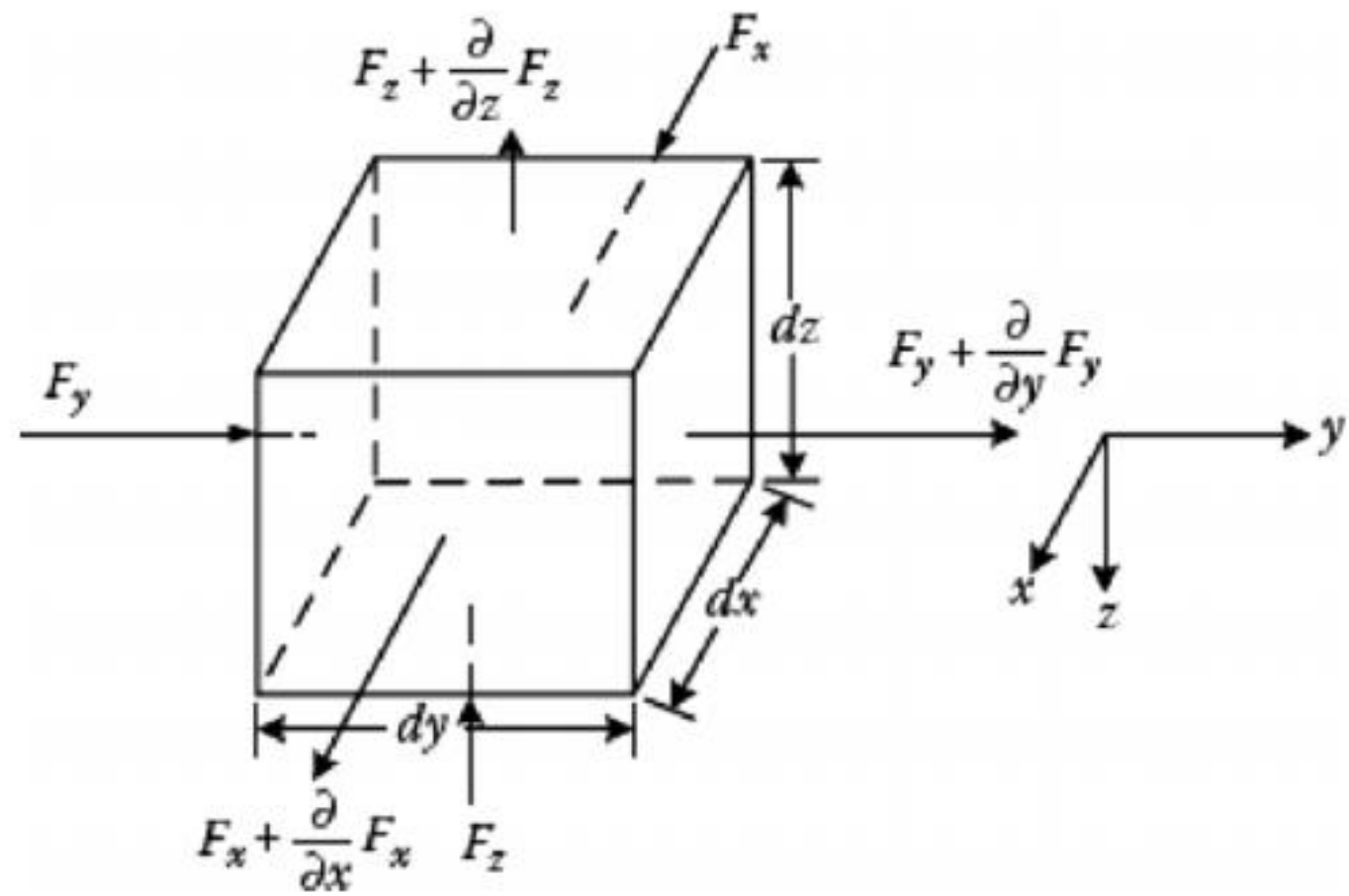
$D^*$  is the effective diffusion coefficient.

For calculating the transverse coefficient of dispersion

$$D_T = \alpha_T v_i + D^*$$

where  $\alpha_T$  is the transverse dynamic dispersivity.





$$T_a = v_i n C dA$$

$$T_d = n D_i \frac{\partial C}{\partial i} dA$$

where:

$T_a$  and  $T_d$  are the advective and dispersive transport, respectively  
 $dA$  is the cross-sectional area of the element.

$$F_i = v_i n C - n D_i \frac{\partial C}{\partial i}$$

از آنجا که شار پخش از مناطق بیشتر به مناطق با غلظت کمتر است ، اصطلاح دوم علامت منفی دارد

The total amount of contaminant entering the representative elementary volume is  $F_x d_z d_y + F_y d_z d_x + F_z d_x d_y$ . The amount of contaminant leaving the representative elementary volume is:

$$\left( F_x + \frac{\partial F_x}{\partial x} dx \right) dz dy + \left( F_y + \frac{\partial F_y}{\partial y} dy \right) dz dx + \left( F_z + \frac{\partial F_z}{\partial z} dz \right) dx dy$$

On the other hand, the rate of mass change in the representative elementary volume is:

$$n \frac{\partial C}{\partial t} dx dy dz$$

If there is a continuous change in concentration of the contaminant (continuous release), the equation is solved as (Sauty, 1978):

$$C = \frac{C_0}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{L - v_x t}{2\sqrt{D_L t}} \right) - \exp \left( \frac{v_x L}{D_L} \right) \operatorname{erfc} \left( \frac{L + v_x t}{2\sqrt{D_L t}} \right) \right]$$

When the distance or time is large, the second term on the right-hand side of Equations 5.26 and 5.30 can be neglected. Therefore,

$$C = \frac{C_0}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{L - v_x t}{2\sqrt{D_L t}} \right) \right]$$

Nitrobenzene is being released from a point source to an aquifer. The hydraulic conductivity of this aquifer is  $4.5 \times 10^{-5}$  m/s, and its porosity is 0.35. The hydraulic gradient in this aquifer is 0.0015 m/m. Assuming that the concentration of nitrobenzene is 670 mg/L at the source, compute the concentration after 2 years at 50 m away from the source. The effective diffusion coefficient for nitrobenzene is assumed to be equal to  $1.12 \times 10^{-8}$  m<sup>2</sup>/s.



To calculate the value of the longitudinal dispersion coefficient, first, the velocity of groundwater and the apparent longitudinal dynamic dispersivity must be computed. Therefore,

$$V_x = \frac{Ki}{n} = \frac{4.5 \times 10^{-5} \text{ m/s} \times 0.0015}{0.35} = 1.9 \times 10^{-7} \text{ m/s}$$

$$\alpha_L = 0.83(\log L)^{2.414} = 0.83(\log 50 \text{ m})^{2.414} = 2.98$$

$D_L$  is calculated as:

$$\begin{aligned} D_L &= \alpha_L \times v_x + D^* = (2.98 \text{ m} \times 1.9 \times 10^{-7} \text{ m/s}) + 1.12 \times 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s} \\ &= 5.77 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s} \end{aligned}$$

$$t = 2 \text{ years} \times 86,400 \text{ s/day} \times 365 \text{ days/year} = 6.3 \times 10^7 \text{ s}$$

Now, the concentration of nitrobenzene after 2 years at 50 m away from the source is calculated as:

$$\begin{aligned} C &= \frac{C_0}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{L - v_x t}{2\sqrt{D_L t}} \right) + \exp \left( \frac{v_x L}{D_L} \right) \operatorname{erfc} \left( \frac{L + v_x t}{2\sqrt{D_L t}} \right) \right] \\ &= \frac{670 \text{ mg/L}}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left( \frac{50 - (1.9 \times 10^{-7} \text{ m/s} \times 6.3 \times 10^7 \text{ s})}{2\sqrt{5.77 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s} \times 6.3 \times 10^7 \text{ s}}} \right) \right\} \end{aligned}$$

$$+ \exp\left(\frac{1.9 \times 10^{-7} \text{ m/s} \times 50 \text{ m}}{5.77 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{50 \text{ m} + (1.9 \times 10^{-7} \text{ m/s} \times 6.3 \times 10^7 \text{ s})}{2\sqrt{5.77 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s} \times 6.3 \times 10^7 \text{ s}}}\right)\Bigg\}$$

$$C = 335 \text{ mg/L} \left[ \operatorname{erfc}\left(\frac{50 \text{ m} - 11.97 \text{ m}}{12.06 \text{ m}}\right) + \exp(16.46) \operatorname{erfc}\left(\frac{50 \text{ m} + 11.97 \text{ m}}{12.06 \text{ m}}\right) \right]$$

$$= 335 \text{ mg/L} \left[ \operatorname{erfc}(3.15) + \exp(16.46) \times \operatorname{erfc}(5.14) \right]$$

$$= 335 \text{ mg/L} \times 1.35 \times 10^{-5}$$

$$= 4.5 \times 10^{-3} \text{ mg/L} = 4.5 \text{ } \mu\text{g/L}$$







