

شبیه‌سازی چرخه گوگرد با استفاده از مدل CE-QUAL-W2 (مطالعه موردی مخزن سد سیمره، ایران)

اسکندر شبان^۱ و حامد کتابچی^{۲*}

چکیده

ترکیبات گوگردی از عوامل آلاینده آب محسوب می‌شوند و توجه به رفتار آنها در پیکره‌های آبی عمیق، مانند مخازن سدها ضروری است. معمول‌ترین ترکیبات گوگردی در این پیکره‌ها، سولفات و سولفید هیدروژن هستند. پیش‌بینی فعل و انفعالات بین این ترکیبات می‌تواند کمک مؤثری در طراحی سازه‌های آبی و مدیریت کیفیت آب نماید. مدل CE-QUAL-W2 ابزار مناسبی برای شبیه‌سازی کیفیت آب در مخازن است که اخیراً توانایی شبیه‌سازی چرخه گوگرد نیز به آن افزوده شده است. در این مطالعه، وضعیت ترکیبات گوگردی به همراه عوامل مهمی مانند لایه‌بندی حرارتی و توزیع اکسیژن محلول در قالب یک نمونه واقعی (در مخزن سد سیمره) شبیه‌سازی شده است. بررسی‌های انجام‌شده در این مطالعه نشان داد که: ۱- رابطه معناداری میان وضعیت اکسیژن محلول و توزیع ترکیبات گوگردی در راستای عمق مخزن وجود دارد، به‌طوری‌که با کاهش اکسیژن محلول بر غلظت سولفید هیدروژن افزوده می‌شود؛ ۲- رفتار چرخه گوگرد به فعل و انفعالات عمدتاً بیولوژیکی در رسوبات کف مخزن مربوط است؛ ۳- با افزایش غلظت سولفات در مخزن، میزان احیای سولفات افزایش می‌یابد و سولفید هیدروژن زیاد می‌شود؛ و ۴- به دلیل ظرفیت محدود انحلال سولفید هیدروژن در آب، این ماده به‌صورت حباب از آب خارج می‌شود، به‌صورتی که با افزایش مقدار سولفات در آب، میزان انتشار سولفید هیدروژن به هوا به‌شدت افزایش می‌یابد.

واژه‌های کلیدی: پیکره‌های آبی عمیق، ترکیبات گوگردی، کیفیت آب، لایه‌بندی حرارتی.

ارجاع: شبان، ا. و کتابچی، ح. ۱۳۹۸. شبیه‌سازی چرخه گوگرد با استفاده از مدل CE-QUAL-W2 (مطالعه موردی مخزن سد سیمره، ایران). ۳۳: ۴۴-۴۳.

۱- دانش‌آموخته کارشناسی ارشد مهندسی منابع آب، گروه مهندسی منابع آب، دانشکده کشاورزی، دانشگاه تربیت مدرس، تهران.
۲- استادیار گروه مهندسی منابع آب، دانشکده کشاورزی، دانشگاه تربیت مدرس، تهران.

* نویسنده مسئول: h.ketabchi@modares.ac.ir

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۶/۰۶/۰۴

تاریخ دریافت: ۱۳۹۵/۱۱/۱۵

مقدمه

ترکیبات گوگردی، از جمله مواد آلاینده محسوب می‌شوند که معمولاً از طریق منابع طبیعی و منابع انسانی وارد پیکره‌های آبی عمیق، از جمله دریاچه‌ها و مخازن سدها می‌شوند که در زمره اصلی‌ترین منابع تأمین نیازهای غالب بشری هستند. از جمله فعالیت‌های انسانی که باعث آلودگی پیکره‌های آبی به ترکیبات گوگردی می‌شوند، می‌توان به تخلیه پساب‌های بهداشتی و صنعتی گوگرددار، حاوی سولفات و اسیدسولفوریک، ناشی از پسماندهای صنایع تولیدی، معادن و عملیات ذوب، کارخانه‌های نساجی و کاغذسازی اشاره کرد (ژانگ و همکاران، ۲۰۱۵). فعالیت‌های آتشفشانی و به طبع آن وجود چشمه‌های گوگردی و وجود کانسارهای گوگردی، یکی دیگر از عوامل مهم گوگردی شدن پیکره‌های آبی هستند. ورود ترکیبات آلی گوگرددار (مانند برخی اسیدهای آمینه) در اثر متلاشی شدن بافت بدن موجودات زنده و تجزیه رسوبات آلی، مانند پوسیدگی گیاهان، اختلاط منابع آبی با آب شور دریا نیز می‌تواند منجر به افزایش غلظت ترکیبات گوگردی شود (مینارد، ۱۹۹۸). از آثار مضر ترکیبات گوگردی بر سلامت انسان می‌توان به ایجاد سردرد، تهوع، سوزش چشم و بینی و گلو، و حتی در غلظت‌های بالاتر به مرگ اشاره کرد (گویدوتی، ۲۰۱۰). علاوه بر آثار محیط‌زیستی، وجود ترکیبات گوگردی در مخازن سدها، باعث خوردگی بتن بدنه سد، برج‌های خنک‌کننده و لوله‌های فلزی می‌شود (مک‌دونیل و همکاران، ۲۰۱۴). از این‌رو، پرداختن به رفتار ترکیبات گوگردی در پیکره‌های آبی اهمیت پیدا می‌کند.

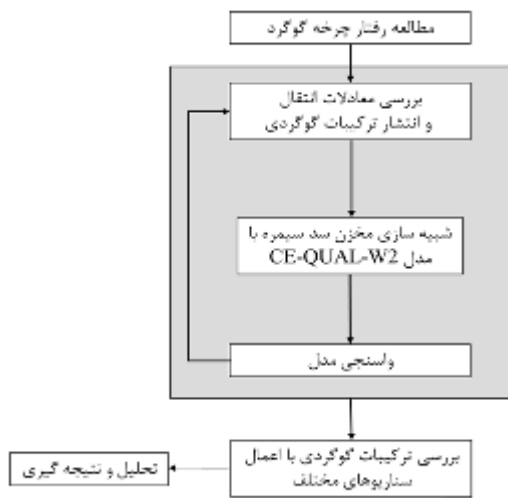
در پیکره‌های آبی، ترکیبات گوگردی براساس شرایط محیطی حاکم، قابلیت تبدیل به همدیگر را دارند که از آن به چرخه گوگرد یاد می‌شود. به دلیل گستردگی و پیچیدگی چرخه گوگرد، ابهامات زیادی در مورد این چرخه وجود دارد و تاکنون، کارهای صورت گرفته در زمینه مطالعه چرخه گوگرد با استفاده از مجموعه‌ای از فرضیات ساده‌کننده صورت گرفته است (فورد، ۱۹۹۰؛ ژانگ و همکاران، ۲۰۱۵). مطالعات بر روی چرخه گوگرد به‌عنوان اولین چرخه بیوژئوشیمی، اولین بار در اواخر قرن نوزدهم توسط افراد پیشگام معروف در این زمینه، سرگئی وینوگرادسکی و مارتینوس بیجرنیک آغاز گردید (لنس و کیون، ۲۰۰۱). مهم‌ترین واکنش چرخه طبیعی گوگرد در

پیکره‌های آبی، واکنش برگشت‌پذیر میان سولفیدهیدروژن و سولفات در محیط آبی است که در قالب واکنش‌های اکسیداسیون و احیاء اتفاق می‌افتد (بس‌بکنینگ، ۱۹۲۵). فرم غالب گوگرد در پیکره‌های آبی و همچنین در آب منفذی نزدیک به سطح رسوبات، سولفات است؛ ولی به تدریج و با افزایش عمق و به‌واسطه تبدیل باکتریایی احیاء، جای خودش را به سولفیدهیدروژن محلول می‌دهد (ژانگ و همکاران، ۲۰۱۵؛ هولمر و استرخلوم، ۲۰۰۱). همچنین، یکی از عمده‌ترین عوامل اثرگذار در چرخه گوگرد، وجود لایه‌بندی حرارتی در مخازن است که سبب کاهش اکسیژن محلول در لایه‌های زیرین آب می‌شود (ژانگ و همکاران، ۲۰۱۵).

غالب مطالعات ترکیبات گوگردی در کارهای پیشین مبتنی بر اندازه‌گیری‌ها بوده است. درنلسر و همکاران (۱۹۹۴) به بررسی تأثیر غلظت سولفات در آب روی احیای سولفات و ذخیره‌سازی سولفید در رسوبات دریاچه مارس پوند در آمریکا پرداختند. آن‌ها آثار غلظت سولفات در احیای سولفات و ذخیره‌سازی سولفید را با استفاده از یک ردیاب در رسوبات دریاچه مارس پوند بررسی کردند. کنلر و همکاران (۲۰۰۴)، ایزوتوپ‌های پایدار سولفات و سولفید، داده‌های هیدروشیمی دریاچه، نمونه‌های آب زیرزمینی، غلظت و نسبت ایزوتوپ و تنوع ترکیبات مختلف گوگرد رسوبات را برای ارزیابی چرخه بیوشیمی گوگرد در آبخوان و رسوبات دریاچه لوساتا و مناطق اطراف آن (واقع در کشور آلمان) بررسی کردند. بررسی آن‌ها نشان داد که اکسیداسیون پیریت منبع غالب سولفات و آهن در دو آبخوان غرب و شرق دریاچه بوده است. درزویسکی و همکاران (۲۰۱۵)، تنوع زیستی گوگرد در رسوبات سه مخزن سد واقع در کشور لهستان را بررسی کردند. بررسی تبادل بین ترکیبات ایزوتوپی سولفات بین ستون آب و رسوبات موجود نشان داد که تفاوتی در غلظت و ترکیب ایزوتوپی سولفات مشاهده نمی‌شود که علت آن عمق کم مخزن و اختلاط کامل آب است.

بررسی مطالعات انجام‌شده در زمینه ترکیبات گوگردی در مخازن نشان می‌دهد که کارهای بسیار اندکی در این حوزه انجام‌شده و غالب این کارها بر مبنای اندازه‌گیری‌ها و کارهای میدانی بوده است. در دهه اخیر، بهره‌گیری از مدل‌های کیفیت آب، همچون CE-QUAL-W2 در مخازن رواج یافته است. در مطالعه‌ای که توسط برگر و ولز

مورد بررسی قرار گرفته و سپس با بهره‌گیری از مدل CE-QUAL-W2، مخزن این سد، شبیه‌سازی و واسنجی مدل انجام شد. در نهایت، با استفاده از مدل واسنجی‌شده، سناریوهای مورد نظر، شبیه‌سازی و تحلیل می‌شوند. مراحل انجام کار، در شکل ۱ ارائه شده‌اند که در ادامه، بیشتر به آنها پرداخته می‌شود.



شکل ۱- مراحل انجام کار

منطقه مورد مطالعه

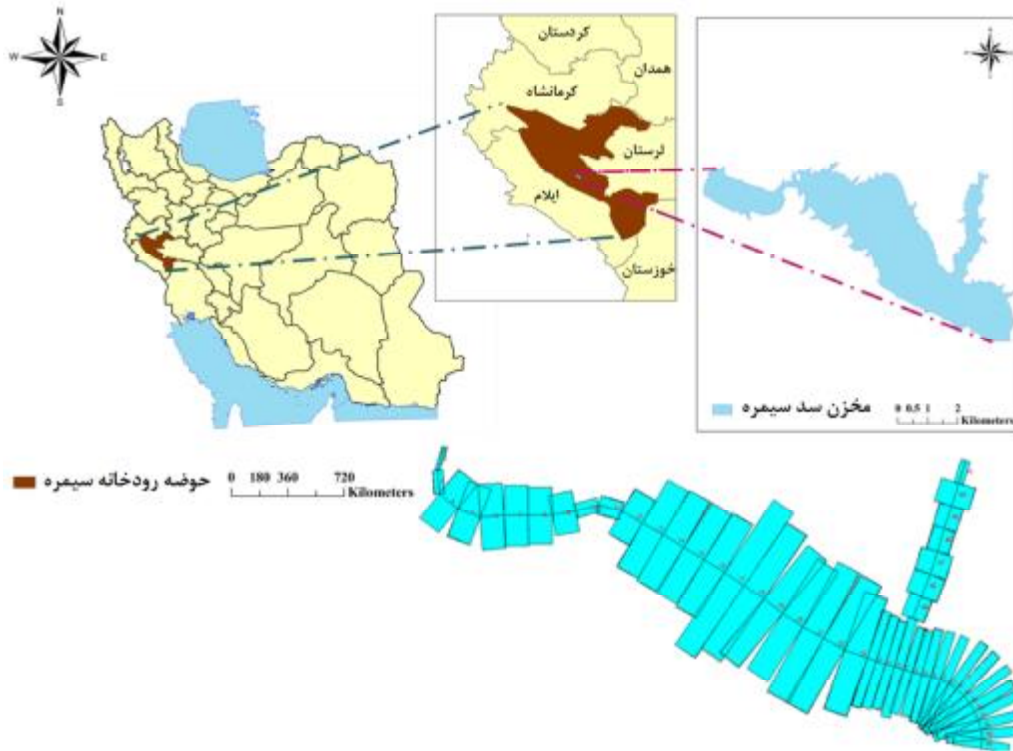
سد سیمره با حجم مخزن ۳۲۱۶ میلیون مترمکعب، مساحت ۹۷ کیلومترمربع و طول دریاچه ۶۰ کیلومتر، در شهرستان دره‌شهر بر روی رودخانه سیمره احداث شده است. این سد برای اهدافی، از جمله تولید ۸۵۰ گیگاوات ساعت در سال انرژی برقی برای کاهش انتشار گازهای گلخانه‌ای، احداث ۳ واحد ۱۶۰ مگاواتی، ذخیره آب ۳۲۰۰ میلیون مترمکعب، کنترل و تنظیم جریان‌های سطحی رودخانه و تأمین حقابه‌های پایین‌دست ساخته شده است (وزارت نیرو، ۱۳۹۰). شکل ۲، موقعیت این سد را در استان ایلام و کشور ایران نشان می‌دهد.

(۲۰۱۴) بر روی مخزن وایاوا در آمریکا با استفاده از مدل CE-QUAL-W2 انجام شد، به بررسی و شبیه‌سازی اکسیژن مورد نیاز رسوبات و همچنین انتقال جرم آمونیاک، فسفات، متان، سولفیدهیدروژن، اکسیژن محلول در ستون آب و رسوبات با استفاده از ماژول دیاجنسیس^۱ مدل CE-QUAL-W2 پرداخته شد؛ ولی به جزئیات چرخه گوگرد در این مطالعه اشاره نشد. فیضی و همکاران (۱۳۹۴)، این مدل را برای شبیه‌سازی ترکیبات آلی فرار در پیکره‌های آبی در حال جریان و ساکن توسعه دادند و در سامانه رودخانه-مخزن کرخه مورد استفاده قرار دادند. راموس و همکاران (۲۰۱۸)، CE-QUAL-W2 را برای شبیه‌سازی آثار هیدرودینامیک و وضعیت لایه‌بندی حرارتی مخزن ماتالایا در اسپانیا استفاده کردند و برای واسنجی مدل از داده‌های اندازه‌گیری شده در سال‌های ۲۰۱۴ و ۲۰۱۵ بهره جستند. شبانی و همکاران (۲۰۱۷) برای تخمین بیلان آب دریاچه دویلز در آمریکا و همچنین دما و غلظت سولفات محلول در آن از مدل تلفیق‌شده CE-QUAL-W2 و SWAT استفاده کردند و این آلاینده را به‌صورت پایستار در پیکره آبی شبیه‌سازی نمودند.

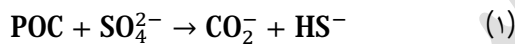
مرور کارهای پیشین نشان می‌دهد که تاکنون به مدل‌سازی چرخه گوگرد در مخازن سدها توجه کافی نشده است. بنابراین، در تحقیق حاضر، ابتدا مبانی نظری و روابط بین ترکیبات گوگردی (سولفات و سولفیدهیدروژن) بررسی و سپس این چرخه در یک نمونه واقعی (مخزن سد سیمره) با استفاده از مدل CE-QUAL-W2 شبیه‌سازی شده است و اثر غلظت‌های مختلف سولفات ورودی به مخزن بر روی رفتار این چرخه و همچنین رفتار عوامل کیفی دیگر از جمله دمای آب و اکسیژن محلول در آب، مورد بررسی قرار گرفته است. هدف اصلی در این‌روند، بررسی این چرخه در قالب یک نمونه واقعی به دور از پیچیدگی‌ها و سایر عوامل، در مخازن واقعی است.

مواد و روش‌ها

در مطالعه حاضر، برای مطالعه رفتار چرخه گوگرد در مخزن سد سیمره، ابتدا روابط انتقال و انتشار ترکیبات گوگردی در محیط آب و اندرکنش آن با رسوب و هوا



شکل ۲- موقعیت منطقه مورد مطالعه و نمایی از مخزن سد سیمره



در این واکنش: POC، ذرات کربن آلی؛ SO_4^{2-} ، سولفات؛ CO_3^{2-} ، دی‌اکسید کربن؛ و HS^- ، سولفید است. معادله بقای جرم واکنش شیمیایی سولفات در لایه‌های هوازی و بی‌هوازی رسوبات به ترتیب در معادلات (۲) و (۳) ارائه شده است (پراکاش و همکاران، ۲۰۱۵).

$$H_1 = \frac{d\text{SO}_{4,1}}{dt} = K_{\text{HS}1} H_1 \text{HS}_1 - K_{\text{L}01} (\text{SO}_{4,1} - \text{SO}_{4,0}) + K_{\text{L}12} (\text{SO}_{4,2} - \text{SO}_{4,1}) - K_{\text{SO}4,1} H_1 \text{SO}_{4,1} \quad (2)$$

$$H_2 = \frac{d\text{SO}_{4,2}}{dt} = -K_{\text{SO}4,2} H_2 \text{SO}_{4,2} - K_{\text{L}12} (\text{SO}_{4,2} - \text{SO}_{4,1}) \quad (3)$$

در این معادلات: $K_{\text{HS}1}$ ، ضریب اکسیداسیون سولفید در لایه هوازی؛ H_1 ، ضخامت لایه هوازی؛ HS_1 ، غلظت سولفید در لایه هوازی؛ $K_{\text{L}01}$ ، ضریب انتقال جرم سولفات بین ستون آب و لایه هوازی؛ $\text{SO}_{4,1}$ ، غلظت سولفات در لایه هوازی؛ $\text{SO}_{4,0}$ ، غلظت سولفات در ستون آب؛ $K_{\text{L}12}$ ، ضریب انتقال جرم سولفات بین لایه هوازی و لایه بی‌هوازی؛ $\text{SO}_{4,2}$ ، غلظت سولفات در لایه بی‌هوازی؛

مدل CE-QUAL-W2

مدل CE-QUAL-W2، مدلی دو بُعدی (متوسط‌گیری شده در عرض) است که برای شبیه‌سازی دما، شرایط هیدرودینامیکی و متغیرهای کیفی آب در مخازن مورد استفاده قرار می‌گیرد. این مدل برای اولین بار در سال ۱۹۷۵ توسعه داده شد و در نسخه اخیر این مدل که در سال ۲۰۱۷ ارائه شد، شبیه‌سازی فرایندهای مهم دیانجسیس در بستر رسوبات به آن افزوده شده است (کول و ول، ۲۰۱۷).

ترکیبات گوگردی (سولفات و سولفید هیدروژن) در پیکره‌های آبی متأثر از فرایندهای تجزیه بیولوژیکی هوازی و بی‌هوازی، تبادل سطحی با اتمسفر، جذب توسط رسوبات، اکسیداسیون و احیاء توسط فرایندهای شیمیایی و بیولوژیکی هستند. فرایندهای اکسیداسیون و احیاء سولفات و سولفید هیدروژن و تبادل سولفید هیدروژن با هوا، فرایندهای مؤثر در فعل و انفعالات ترکیبات گوگردی در CE-QUAL-W2 هستند (کول و ول، ۲۰۱۷). در ادامه به بررسی این فرایندها پرداخته می‌شود.

واکنش شیمیایی احیاء سولفات به سولفید هیدروژن به صورت معادله (۱) است (پراکاش و همکاران، ۲۰۱۵).

در این شبیه‌سازی، سد سیمره به ۵۰ بخش طولی با فواصل ۲۰۰ و ۵۰۰ متری و همچنین به ۴۳ لایه در جهت قائم با فواصل دو متری شبکه‌بندی شد. همچنین، ضرایب سایه و پوشش باد برای مقاطع طولی مخزن به ترتیب مقادیر ۱ و ۰/۹ در نظر گرفته شد. در شکل ۲، هندسه مخزن در راستای طولی نشان داده شده است.

فرایند واسنجی

فرایند واسنجی مدل تهیه‌شده در این مطالعه بر مبنای داده‌های حجم-سطح-ارتفاع برای واسنجی هندسی، داده‌های دما در عمق مخزن برای واسنجی دما و داده‌های اکسیژن محلول اندازه‌گیری‌شده در عمق مخزن برای واسنجی شرایط کیفی انجام می‌پذیرد. بدین‌منظور از داده‌های برداشت‌شده در بازهٔ دی‌ماه ۱۳۹۰ تا دی‌ماه ۱۳۹۲ استفاده شد و شرایط اختلاط کامل و با لایه‌بندی حرارتی در طول سال مورد توجه قرار گرفت.

برای سنجش مقدار خطای مدل واسنجی‌شده در مقایسه با مقادیر مشاهداتی از دو معیار ارائه‌شده در معادلات (۸) و (۹) استفاده می‌شود که به ترتیب میانگین خطای مطلق (AME)^۱ و خطای جذر میانگین مربعات (RMSE)^۲ هستند:

$$AME = \frac{\sum_{i=1}^n |x_p^i - x_o^i|}{n} \quad (8)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_p^i - x_o^i)^2}{n}} \quad (9)$$

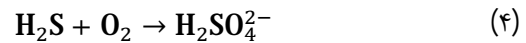
در این معادلات: x_p مقدار محاسباتی مدل؛ x_o مقدار مشاهداتی؛ و n ، تعداد داده‌های مورد نظر است.

نتایج و بحث

واسنجی مدل

در اولین گام از مراحل واسنجی قسمت‌های مختلف، مدل هیدرودینامیکی واسنجی شد. در دومین گام، به واسنجی دما پرداخته شد و بالاخره در گام سوم، مؤلفهٔ کیفی به‌عنوان نامطمئن‌ترین قسمت مدل، شبیه‌سازی و واسنجی شد. برای انجام واسنجی هندسی و سطح آب از نمودارهای حجم-سطح-ارتفاع استفاده شد. تصحیح عرضی مقاطع مختلف مؤثر در طول و لایه‌های مختلف هندسه مخزن تنظیم می‌شود تا حجم و سطح محاسباتی مدل به واقعیت

$K_{SO4,1}$ ضریب احیای سولفات در لایه هوازی؛ $K_{SO4,2}$ ضریب احیای سولفات در لایه بی‌هوازی؛ و H_2 ضخامت لایه بی‌هوازی است. واکنش شیمیایی اکسیداسیون سولفیدهیدروژن به‌صورت معادله (۴) است (پراکاش و همکاران، ۲۰۱۵).



در این واکنش: H_2S سولفیدهیدروژن؛ O_2 اکسیژن؛ و $H_2SO_4^{2-}$ اسیدسولفوریک است.

معادلهٔ بقای جرم سولفید در لایه‌های هوازی و بی‌هوازی رسوبات به ترتیب در معادلات (۵) و (۶) ارائه داده شده است (پراکاش و همکاران، ۲۰۱۵).

$$H_1 = \frac{dHS_1}{dt} = K_{SO4,1} H_1 SO_{4,1} - K_{L01} (HS_1 - HS_0) + K_{L12} (HS_2 - HS_1) - K_{HS_1} H_1 HS_1 \quad (5)$$

$$H_2 = \frac{dHS_2}{dt} = K_{SO4,2} H_2 SO_{4,2} - K_{L12} (HS_2 - HS_1) \quad (6)$$

در این معادلات: HS_1 غلظت سولفید در لایه هوازی؛ HS_0 غلظت سولفید در ستون آب و HS_2 ، غلظت سولفید در لایه بی‌هوازی است.

تولید مداوم گازهای محلول مانند سولفیدهیدروژن از طریق فرایند دی‌اجنسیس در شرایط اشباع باعث تولید حباب می‌شود. رابطهٔ نسبت تعادل بین فاز مایع و فاز گاز محلول توسط قانون هنری بیان می‌شود. نرخ تبادل سولفیدهیدروژن با هوا با استفاده از معادله (۷) به‌دست می‌آید (کول و ول، ۲۰۱۷).

$$K_{H_2S} = K_{O_2} \left(\frac{MW_{O_2}}{MW_{H_2S}} \right)^{0.25} \quad (7)$$

در این رابطه: K_{O_2} ضریب تبادل اکسیژن با جو؛ و MW وزن مولکولی ترکیبات است.

شبیه‌سازی عددی

اطلاعات مورد نیاز برای شبیه‌سازی، شامل اطلاعات هندسی، هواشناسی (دمای هوا، نقطهٔ شبنم، درصد ابرناکی و سرعت و جهت باد)، ضرایب پوشش گیاهی، پوشش باد، شرایط اولیه (دما در اولین روز شبیه‌سازی) و شرایط مرزی (دبی ورودی و خروجی روزانه) هستند. این داده‌ها از نزدیک‌ترین ایستگاه سد سیمره (ایستگاه ایلام) و به‌صورت ساعتی برآورد شده‌اند.

1- Absolute Mean Error (AME)

2- Root Mean Square Error (RMSE)

به‌دست آمد. مقادیر این خطاها برای حجم و سطح مخزن در جدول ۱ خلاصه شده است.

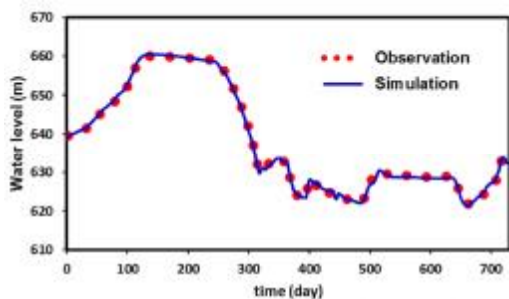
نزدیک‌تر شد. بر این اساس، مقادیر میانگین خطای مطلق و خطای جذر میانگین مربعات حجم برآوردشده در این مطالعه، به‌ترتیب برابر ۰/۳۸ و ۱/۱۳ میلیون مترمکعب

جدول ۱- مقادیر خطای واسنجی مدل در مخزن سد سیمره

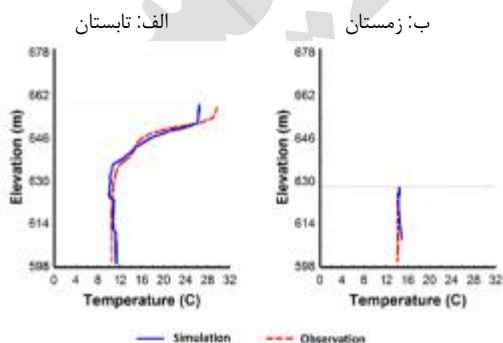
معیار خطا		زمان	واحد	پارامتر واسنجی
RMSE	AME			
۱/۱۳	۰/۳۸	-	میلیون مترمکعب	حجم مخزن برحسب ارتفاع
۰/۵۷	۰/۴۹	-	میلیون مترمربع	مساحت مخزن برحسب ارتفاع
۰/۳۱	۰/۱۷	-	متر	تراز سطح آب مخزن
۱/۱۴	۰/۸۷	تابستان	درجه سانتی‌گراد	توزیع دما
۰/۳۰	۰/۲۵	زمستان		
۱/۱۷	۰/۹۱	تابستان		
۱/۷۴	۱/۵۳	زمستان	میلی گرم بر لیتر	توزیع اکسیژن محلول

وضعیت اختلاط کامل و توزیع یکنواخت دما در عمق مشاهده می‌شود. در جدول ۱، خطاهای واسنجی مدل برای توزیع دما ارائه شده است.

پس از انجام واسنجی هندسی، با داشتن تراز سطح آب میانگین روزانه در مخزن به‌صورت داده‌های مشاهده‌ای برای دو سال اشاره شده، مقدار تراز سطح آب شبیه‌سازی شده از مدل استخراج و با هم مقایسه شد که این نتایج در شکل ۳ آورده شده است. همان‌طور که دیده می‌شود نتایج حاصل از مدل به‌صورت مطلوب توانسته است مقدار تراز سطح آب را نیز در مخزن شبیه‌سازی کند. مقدار میانگین خطای مطلق حاصل از این مقایسه در طول دوره شبیه‌سازی ۰/۱۷ متر تخمین زده شد که حاکی از دقت واسنجی تراز سطح آب است. خطای جذر میانگین مربعات نیز برای این پارامتر برابر ۰/۳۱ متر است (جدول ۱). در این مطالعه برای انجام واسنجی دما از داده‌های ماهیانه حد فاصل دی‌ماه ۱۳۹۰ تا دی‌ماه ۱۳۹۲ در عمق مخزن استفاده شد. پس از انجام تحلیل حساسیت نسبت به ضرایب واسنجی، ضرایب واسنجی مؤثر بر لایه‌های مختلف دسته‌بندی و در ابتدا ضرایب با بیشترین تأثیر، واسنجی شدند. با نزدیک شدن رفتار پروفیل‌های شبیه‌سازی شده به رفتار پروفیل‌های مشاهده‌ای، سایر ضرایب واسنجی مورد استفاده قرار گرفتند تا دقت شبیه‌سازی بالا برده شود؛ همان‌طور که در شکل ۴ مشاهده می‌شود، میانگین خطای مطلق مقایسه داده‌های اندازه‌گیری و شبیه‌سازی دما برای شکل‌های ۴-الف و ۴-ب، به‌ترتیب ۰/۸۷ و ۰/۲۵ درجه سانتی‌گراد در تابستان و زمستان است که نشان از انطباق بین مقادیر اندازه‌گیری و شبیه‌سازی است. همان‌طور که انتظار می‌رود در فصل تابستان، مخزن دارای لایه‌بندی حرارتی است و در زمستان این شرایط به‌هم خورده و

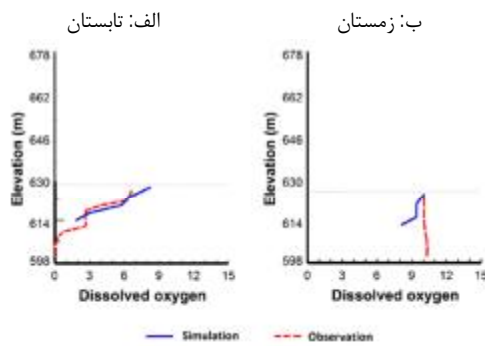


شکل ۳- مقایسه تراز سطح آب مشاهده‌ای و شبیه‌سازی شده در مخزن سد سیمره



شکل ۴- مقایسه توزیع دمای مشاهده‌ای و شبیه‌سازی شده در مخزن سد سیمره

تابستان (زمان لایه‌بندی حرارتی) را برای سناریوی اول نشان می‌دهد. همان‌طور که در شکل ۶ مشاهده می‌شود در تراز ۶۳۵-۶۴۰ متری مخزن تغییرات شدید حرارتی وجود دارد که نشان از وجود لایه‌بندی در این زمان از مدل‌سازی است. در مورد اکسیژن محلول، همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش عمق، مقدار اکسیژن محلول در آب کاهش پیدا می‌کند که در لایه‌های زیرین مخزن باعث کمبود اکسیژن می‌شود. سولفات در لایه‌های سطحی آب به دلیل غنای بالای اکسیژن محلول، با اکسیدشدن سولفید هیدروژن حداکثر مقدار خود را دارد. از طرفی، با افزایش عمق مخزن، میزان اکسیژن محلول در آب کاهش پیدا می‌کند و سولفات احیاء شده و سولفید هیدروژن تولید می‌شود.



شکل ۵- مقایسه توزیع اکسیژن محلول مشاهداتی و شبیه‌سازی شده در مخزن سد سیمره

پس از واسنجی دما، عوامل کیفی آب که فرایند تغییرات آن در پیکره آبی مدل‌سازی شده است، واسنجی می‌شوند. به همین منظور، به واسنجی توزیع اکسیژن محلول در مخزن سد سیمره براساس داده‌های اندازه‌گیری شده ماهیانه در طول یک سال پرداخته شد. شکل‌های ۵- الف و ۵- ب، نمودارهای واسنجی اکسیژن محلول سد سیمره را برای دو حالت لایه‌بندی حرارتی در تابستان و اختلاط کامل در زمستان نشان می‌دهند. اکسیژن محلول در شرایط لایه‌بندی حرارتی تابستان دارای مقادیر کمتر در عمق است که منجر به وقوع شرایط بی‌هوایی در اعماق مخزن می‌شود. همان‌طور که از جدول ۱ مشاهده می‌شود، میانگین خطای مطلق بین داده‌های شبیه‌سازی شده و اندازه‌گیری اکسیژن محلول برای شکل ۵- الف، ۰/۹۱ میلی‌گرم بر لیتر و شکل ۵- ب، ۱/۵۳ میلی‌گرم بر لیتر است. خطای جذر میانگین مربعات نیز به همین ترتیب در تابستان و زمستان به ترتیب ۱/۱۷ و ۱/۷۴ میلی‌گرم بر لیتر برآورد شد (جدول ۱).

از مجموعه‌ای از ضرایب و پارامترها برای شبیه‌سازی چرخه گوگرد در مدل CE-QUAL-W2 استفاده شد که فهرست مهم‌ترین این ضرایب و پارامترها در جدول ۲ ارائه شده است. در ادامه، عملکرد مدل در شبیه‌سازی رفتار چرخه گوگرد در مخزن سد سیمره در قالب دو سناریو، بررسی و تحلیل می‌شود.

شکل ۶، رفتار اکسیژن محلول، دما، سولفات و سولفید هیدروژن در بخش نزدیک خروجی مخزن در

جدول ۲- مقادیر ضرایب و پارامترهای مؤثر در شبیه‌سازی چرخه گوگرد در مخزن سد سیمره

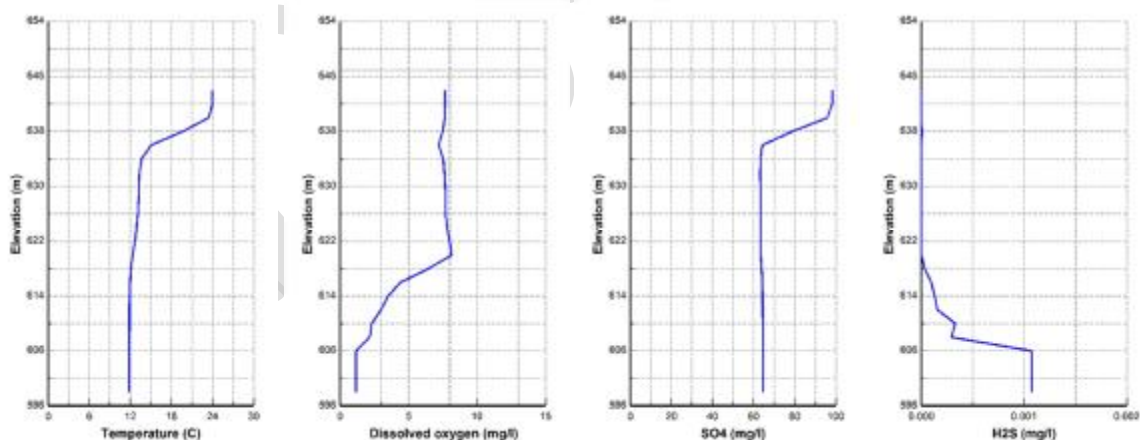
پارامتر	واحد	مقدار نهایی	مراجع نمونه
ضخامت اولیه بستر	متر	۲	(کول و ول، ۲۰۱۷)
تخلخل اولیه رسوبات بستر	درصد	۰/۸	(کول و ول، ۲۰۱۷)
دمای اولیه محیط	درجه سلسیوس	۱۵	(وزرات نیرو، ۱۳۹۰)
چگالی رسوبات	کیلوگرم بر مترمکعب	۲۶۰۰	(کول و ول، ۲۰۱۷)
ضریب دما برای انتشار آب منفذی بین لایه‌ها	-	۱/۰۸	(کول و ول، ۲۰۱۷)
نرخ اکسیداسیون سولفید در لایه هوایی	متر بر روز	۰/۲	(هردیچک و همکاران، ۱۹۸۵)
نرخ احیای سولفات	میلی‌گرم بر لیتر بر روز	۰/۱۶	(روود و همکاران، ۱۹۸۶)
ضریب دما برای اکسیداسیون سولفید	-	۱/۰۸	(کول و ول، ۲۰۱۷)
ثابت هنری تبدیل سولفید هیدروژن مایع به گاز	اتم‌سفر بر مول	۱۰	(کول و ول، ۲۰۱۷)
اندازه انتشار حباب‌ها	-	۰/۰۲	(کول و ول، ۲۰۱۷)
شرایط تثبیت رسوبات مخزن	-	متغیر	(کول و ول، ۲۰۱۷)
نوع رسوبات	-	چسبنده	(کول و ول، ۲۰۱۷)
ضریب اکسیژن‌خواهی رسوبات (SOD)	گرم بر مترمربع بر روز	۱/۳	(وزرات نیرو، ۱۳۹۰)

عمق روند ثابت و یکنواختی است (شکل ۹). در این حالت به دلیل وجود اکسیژن محلول در اعماق زیرین مخزن، مخزن در اعماق خود دچار کمبود اکسیژن نمی‌شود. در این وضعیت، احیای سولفات و تولید سولفید هیدروژن متوقف می‌شود. رفتار عمومی چرخه گوگرد در هر دو سناریو مشابه است و غلظت سولفات است که بیشترین تغییرات را در مقایسه دو سناریو دارد.

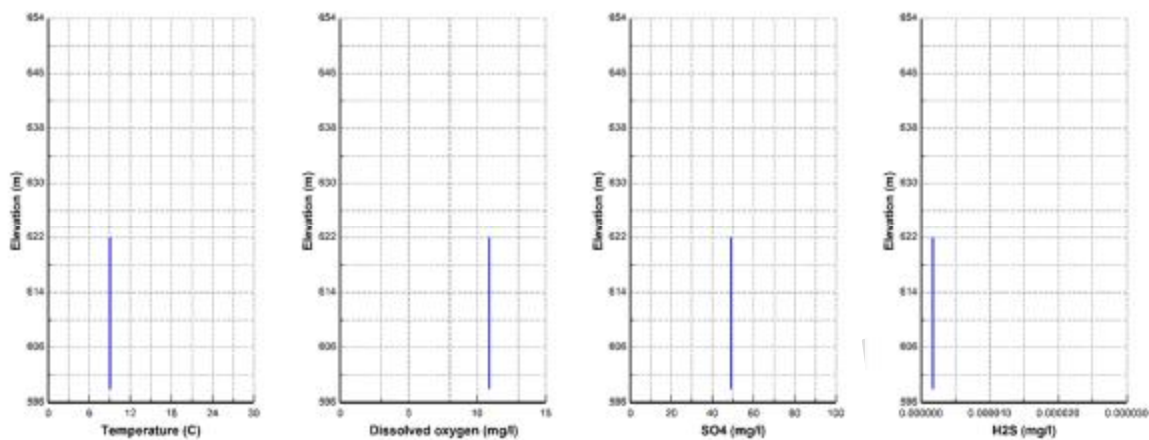
به دلیل محدودیت انحلال گاز سولفید هیدروژن در آب، این گاز تمایل به انتشار به صورت حباب از داخل آب به هوا را دارد. براساس نتایج مدل، میانگین روزانه سولفید هیدروژن منتشر شده به هوا برای غلظت‌های مختلف سولفات، برآورد شد. این کمیت در غلظت ۴۵ میلی‌گرم بر لیتر سولفات در حدود ۱۴۰ گرم بر روز است؛ در حالی که با افزایش غلظت سولفات ورودی به ۳۸۷ میلی‌گرم بر لیتر، مقدار سولفید هیدروژن ورودی به هوا به ۶۰۵ گرم بر روز می‌رسد که نشان‌دهنده افزایش بیش از ۳ برابری گاز منتشر شده است. بنابراین، برای شرایطی که غلظت سولفات ورودی به مخزن بیشتر است، استشمام بوی سولفید هیدروژن به دلیل انتشار بیشتر آن به هوا قابل پیش‌بینی است؛ در حالی که غلظت آن تفاوت محسوسی در آب ندارد.

بررسی نتایج حاصل از شبیه‌سازی چرخه گوگرد در سناریوی اول (شکل ۷) نشان می‌دهد، در حالتی که مخزن به صورت اختلاط کامل در زمستان است، به دلیل وجود اکسیژن محلول کافی در اعماق مخزن، نحوه تغییرات پارامترهای مؤثر چرخه گوگرد در عمق مخزن روند ثابت و یکنواختی دارد. همان‌طور که در شکل ۷ مشاهده می‌شود، غلظت اکسیژن محلول در کف مخزن در حدود ۱۱ میلی‌گرم بر لیتر است که باعث می‌شود احیای سولفات و به دنبال آن تولید سولفید هیدروژن در مخزن صورت نگیرد و مخزن دچار آلودگی ناشی از وجود سولفید هیدروژن نشود.

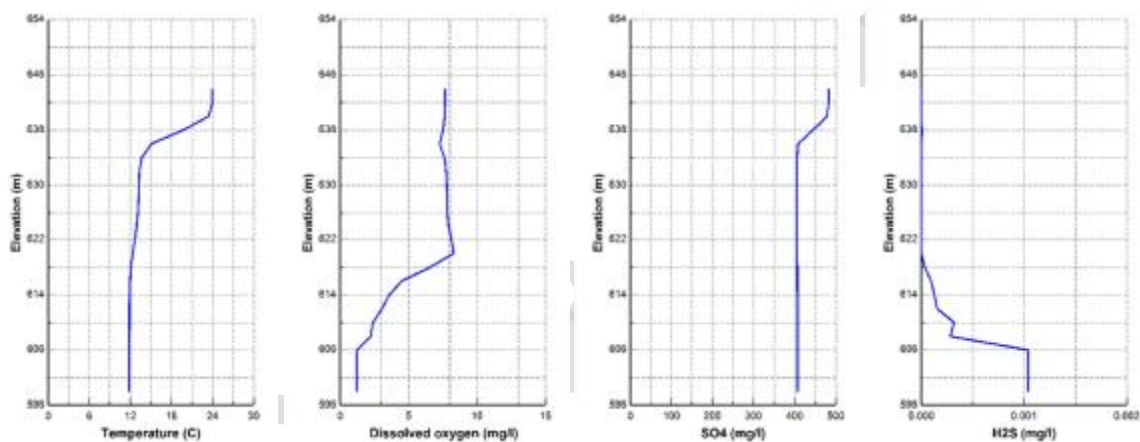
در سناریوی دوم با توجه به شکل ۸، لایه‌بندی حرارتی در مخزن در تابستان کاملاً مشهود است. روند تغییرات اکسیژن محلول در این دوره از سطح به عمق مخزن کاهش یافته است و این کاهش از تراز ۶۲۰ متر به وضوح مشاهده می‌شود. دقیقاً از همین تراز با آغاز روند احیای سولفات، تولید سولفید هیدروژن آغاز می‌شود. سولفات نیز در لایه‌های سطحی مخزن حداکثر مقدار را دارد. در حالتی که مخزن در زمستان به صورت اختلاط کامل است، نحوه تغییرات پارامترهای مؤثر در چرخه گوگرد در کل



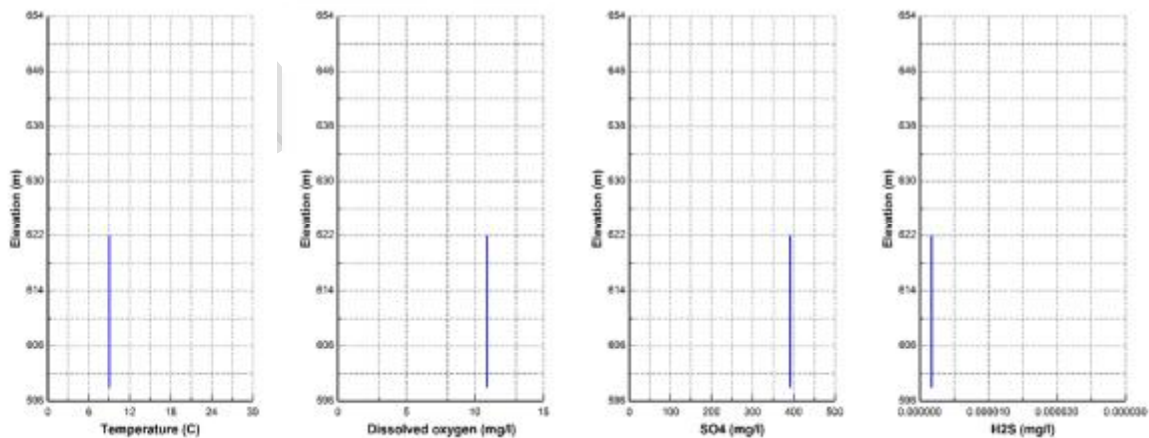
شکل ۶- رفتار دما، اکسیژن محلول، سولفات و سولفید هیدروژن در تابستان برای سناریوی اول



شکل ۷- رفتار دما، اکسیژن محلول، سولفات و سولفید هیدروژن در زمستان برای سناریوی اول



شکل ۸- رفتار دما، اکسیژن محلول، سولفات و سولفید هیدروژن در تابستان برای سناریوی دوم



شکل ۹- رفتار دما، اکسیژن محلول، سولفات و سولفید هیدروژن در زمستان برای سناریوی دوم

توجه به رفتار این ترکیبات و چرخه گوگرد در این محیط‌های آبی برای مدیریت بهتر کیفیت منابع آب لازم است. در مطالعه حاضر، به بررسی و مطالعه چرخه گوگرد

نتیجه‌گیری

ترکیبات گوگردی در پیکره‌های آبی عمیق، مانند مخزن سدها می‌تواند منشأ آلودگی منابع آب شود. از این‌رو،

۲. وزارت نیرو. ۱۳۹۰. گزارش مطالعات مرحله دوم طرح سد مخزنی و نیروگاه برقی سیمره، شرکت توسعه منابع آب و نیروی ایران. ۳۰۰ ص.
3. Baas-Becking L. 1925. Studies on the Sulphur bacteria. *Annals of Botany*. 39(155): 613-650.
4. Berger C. and Wells S. A. 2014. Updating the CEMA oil sands pit lake model, Cumulative Environmental Management Association (CEMA). 86 p.
5. Cole T. M. and Wells S. A. 2017. CE-QUAL-W2: A two-dimensional. Laterally averaged. Hydrodynamic and water quality model. Version 4.0. 843 p.
6. Dornblaser M. Giblin A. Fry B. and Peterson B. 1994. Effects of sulfate concentration in the overlying water on sulfate reduction and sulfur storage in lake sediments. *Biogeochemistry*. 24(3): 129-144.
7. Drzewicki W. Ciężka M. Jezierski P. and Jędrysek M. O. 2015. Variability of sulfur speciation in sediments from Sulejów. Turawa and Siemianówka dam reservoirs (Poland). *Open Geosciences*. 7(1): 1-8.
8. Ford D. E. 1990. Reservoir transport processes. p.15-41. In K.W. Thornton, B.L. Kimmel and F.E. Payne (eds). *Reservoir Limnology: Ecological Perspectives*. John Wiley & Sons. New York. 246 p.
9. Guidotti T. L. 2010. Hydrogen sulfide: advances in understanding human toxicity. *International journal of toxicology*. 29(6): 569-581.
10. Holmer M. and Storkholm P. 2001. Sulphate reduction and Sulphur cycling in lake sediments: a review. *Freshwater Biology*. 46(4): 431-451.
11. Hordijk K. A. Hagenars C. P. and Cappenberg T. E. 1985. Kinetic studies of bacterial sulfate reduction in freshwater sediments by high-pressure liquid chromatography and microdistillation. *Applied and Environmental Microbiology*. 49(2): 434-440.
12. Knöller K. Fauville A. Mayer B. Strauch G. Friese K. and Veizer J. 2004. Sulfur cycling in an acid mining lake and its vicinity in Lusatia. Germany. *Chemical Geology*. 204(3-4): 303-323.
13. Lens P. and Kuenen J. 2001. The biological sulfur cycle: novel opportunities for environmental biotechnology. *Water Science and Technology*. 44(8): 57-66.
14. Maynard D. G. 1998. Sulfur in the Environment. Editor. Marcel Dekker. New York. 371 p.
15. McDonnell T. C. Sullivan T. J. Hessburg P. F. Reynolds K. M. Povak N. A. Cosby B. J.

در مخزن سد سیمره پرداخته شد و وضعیت ترکیبات گوگردی به همراه عوامل مهم کیفی، مانند لایه‌بندی حرارتی و توزیع اکسیژن محلول، در قالب دو سناریو (غلظت‌های سولفات ورودی ۴۵ و ۳۸۷ میلی‌گرم بر لیتر) شبیه‌سازی شد و آنها مورد بررسی قرار گرفتند. نتایج مطالعه حاضر نشان داد، اکسیژن محلول، یکی از عوامل تعیین‌کننده در توزیع عمقی ترکیبات گوگردی در راستای عمق مخزن است؛ به‌صورتی که با کاهش مقدار آن، سولفات محلول در آب احیا شده و به غلظت سولفید هیدروژن افزوده می‌شود؛ از طرفی، مشخص شد که مهم‌ترین عامل مؤثر در رفتار چرخه گوگرد و فعل و انفعالات آن در پیکره‌های آبی عمدتاً فعالیت‌های بیولوژیکی هستند. نتایج نشان داد که با افزایش غلظت سولفات در مخزن میزان احیای سولفات در مخزن افزایش می‌یابد که منجر به افزایش میزان سولفید هیدروژن در مخزن می‌شود. سولفید هیدروژن تولید شده به دلیل وجود ظرفیت انحلال محدود در آب به صورت حباب از آب خارج می‌شود. میزان انتشار سولفید هیدروژن به هوا نشان داد که غلظت سولفات در آب، عامل تعیین‌کننده‌ای در میزان سولفید هیدروژن منتشر شده به هواست. جلوگیری از ورود سولفات به مخزن با کنترل منشأ این آلاینده در بالادست و بهره‌گیری از ترفندهایی (مانند هوادهی مخزن) که از وقوع شرایط بی‌هوازی در مخزن ممانعت می‌کند، از مهم‌ترین راهکارهایی است که برای کاهش تولید سولفید هیدروژن در آب و انتشار آن به هوا می‌توان مدنظر قرار داد.

سیاس‌گذاری

نویسندگان این مقاله از شرکت توسعه منابع آب و نیروی ایران به دلیل در اختیار قراردادن داده‌ها و اطلاعات مورد نیاز مطالعه موردی این پژوهش، کمال تشکر و سپاس را دارند.

منابع

۱. فیضی ف. افشار ع. و سعادت پور م. ۱۳۹۴. توسعه مدل CE-QUAL-W2 برای شبیه‌سازی ترکیبات آلی فرار در سامانه رودخانه-مخزن. مجله آب و فاضلاب. ۲۶(۵): ۳۵-۴۷.

- Jackson W. and Salter R. B. 2014. Steady state sulfur critical loads and exceedances for protection of aquatic ecosystems in the U.S. southern Appalachian Mountains. *Journal of Environmental Management*. 14(6): 407-419.
16. Prakash S. Vandenberg. J. A. and Buchak. E. M. 2015. Sediment diagenesis module for CE-QUAL-W2 Part 2: numerical formulation. *Environmental Modeling & Assessment*. 20(3): 249-258.
17. Ramos-Fuertes A. Palau A. and Dolz J. 2018. Application of a two-dimensional water quality model (CE-QUAL-W2) to the thermal impact assessment of a pumped-storage hydropower plant project in a mountainous reservoir (Matalavilla, Sil River, Spain). In: Gourbesville P., Cunge J., Caignaert G. (eds) *Advances in Hydroinformatics*. Springer Water. Springer, Singapore. 301-314.
18. Rudd J. W. Kelly C. and Furutani. A. 1986. The role of sulfate reduction in long term accumulation of organic and inorganic sulfur in lake sediments. *Limnology and Oceanography*. 31(6): 1281-1291.
19. Shabani A. Xiaodong Z. and Mike Ell. 2017. Modeling water quantity and sulfate concentrations in the devils lake watershed using coupled SWAT and CE-QUAL-W2. *JAWRA Journal of the American Water Resources Association*. 53(4): 748-760.
20. Zhang Z. Sun B. and Johnson B. E. 2015. Integration of a benthic sediment diagenesis module into the two dimensional hydrodynamic and water quality model-CE-QUAL-W2. *Ecological Modelling*. 29(7): 213-231.

Simulation of Sulfur Cycle using CE-QUAL-W2 model (Case Study of Seymareh Dam Reservoir, Iran)

E. Shaban¹ and H. Ketabchi^{2*}

Abstract

In recent decades, due to the importance of water quality issues and controlling the proposed environmental damages, the study of the behavior of pollutants in water bodies has also become important. Sulfur compounds are contaminating factors in water bodies which should be considered in deep water bodies such as lakes and reservoirs of dams. The most common sulfur compounds in deep water bodies are sulfate and hydrogen sulfide. Accurate prediction of the interactions between these compounds can be helpful in designing hydraulic structures and water quality management.

The present study is the first task to examine this context and consider how they interact with each other. The international experiences in dealing with high concentrations of sulfur compounds in reservoirs of dams and lakes are investigated in this study. This study also examines the relationship between the physical, chemical and biological reactions of the sulfur cycle in aquatic environments. The modeling will focus on two main sulfur compounds in the water, namely sulfate and hydrogen sulfide. To simulate water quality in the reservoirs, the CE-QUAL-W2 model which has recently been upgraded to the simulation of the sulfur cycle, has been employed. After model setup, its calibration is performed. Another point to be noted is that the spatial and temporal distribution of sulfur compounds is influenced by reaction factors and parameters affecting the temperature, hydrodynamics and the distribution of these types of pollutants. Setting the coefficients and parameters effective in the process of biological deterioration can be caused by the behavior of sulfur compounds. Access to the field data is a challenging task in this effort. In order to achieve this (to reduce the error of the spatial and temporal concentration of sulfur compounds), in this research, the choice of these coefficients is based on the quantities available in valid references.

Modeling the concentration of sulfur compounds in water due to the multiplicity of factors affecting the biological and chemical reactions of the sulfur cycle in aquatic environments is essentially a difficult and challenging issue. According to this, the necessity of studying this problem in water bodies seems to be necessary. On the other hand, no studies have been conducted to identify, investigate and use numerical models to simulate sulfur compounds (sulfate and sulfide hydrogen) in water bodies in Iran. It seems that this research can be the first tackle to resolve the uncertainties and problems associated with the sulfur cycle in aquatic structures, and to examine the behavior of this cycle in the actual reservoir of the dam in Iran. In general, the objectives of this study are in two general sections. First, the study of the behavior of sulfur cycle in deep water bodies such as lakes and reservoirs of dams playing an important role in the behavior and performance of reservoirs of dams. Then, identification and prediction of the behavior and effects induced by sulfur compounds in a case study using CE-

1- M.Sc., Water Resources Engineering Department, Agriculture Faculty, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran.

2- Assistant Professor, Water Resources Engineering Department, Agriculture Faculty, Tarbiat Modares University, Iran.

* Corresponding author: h.ketabchi@modares.ac.ir

Received: 2015/08/16

Accepted: 2018/01/17

QUAL-W2. In fact, behavior identification and assessment of the effects of contaminants are an essential step to ensure from the proper implementation of a project and a method for determining, predicting, controlling and changing their effects on the entire environment, public health, and the health of ecosystems that sustain life and survival of humans. In this study, the status of sulfur compounds is simulated in various scenarios, along with important quality factors such as thermal stratification and dissolved oxygen distribution in the platform of a real case study (Seymareh Dam reservoir). Additionally, based on the model results and analyzing these scenarios, analyzing the time trends and predicted depth profile for probable concentrations of sulfur compounds (sulfate and sulfide hydrogen) and analyzing the behavior sensitivity of these compounds are examined compared to different parameters.

The results of the present study revealed: (1) a significant relationship between the dissolved oxygen status and the distribution of sulfur compounds along the reservoir depth exists, so that, the concentration of hydrogen sulfide is increased as the dissolved oxygen decreases; (2) the behavior of the sulfur cycle is largely related to the interaction of main biological agents in the sediments of the reservoir bed; (3) with increasing sulfate concentration in the reservoir, the amount of sulfate reduction increases and it leads to an increase in hydrogen sulfide in the reservoir; (4) considering the limited capacity of dissolution of hydrogen sulfide in water, this substance is released as a bubble from the water so that the amount of hydrogen sulfide emissions increases rapidly with increasing sulfate content in water.

Keywords: Deep water systems, Sulfur compounds, Thermal stratification, Water quality.

Citation: Shaban E. and Ketabchi H. ????. Simulation of sulfur cycle using CE-QUAL-W2 model (Case study of Seymareh dam reservoir, Iran). Iranian Water Research Journal