



Using one-step group preserving schemes for contaminant transport modeling in rivers

Amir Mohammad Saadat¹ | Mehdi Mazaheri²

1. Department of Water Engineering and Management, Faculty of Agriculture, University of Tarbiat Modares, Tehran, Iran. E-mail: a.saadat@modares.ac.ir

2. Corresponding Author, Department of Water Engineering and Management, Faculty of Agriculture, University of Tarbiat Modares, Tehran, Iran. E-mail: m.mazaheri@modares.ac.ir

Article Info

Article type: Research Article

Article history:

Received: Sep. 13, 2023

Revised: Nov. 18, 2023

Accepted: Nov. 22, 2023

Published online: Jan. 21, 2024

Keywords:

Advection-Dispersion-Equation,
Identification of Contaminant
Sources,
Inverse Method,
Numerical Method,
One-Step Group Preserving Scheme.

ABSTRACT

The recent escalation of environmental concerns necessitates the development of computer models able to predict pollutant dispersal in natural aquatic systems, rendering them an absolute essentiality. Unlike physical models, the primacy of such computer models lies in their lower costs and facile adaptability to novel conditions. In order to resolve the pollution transport equation in rivers, both directly and inversely, the Group Preserving Scheme has been employed. As expeditious simulation of the pollutant intensity function is imperative, determining a technique to achieve this with celerity is essential. Solving the pollution transport equation in one time step utilizing GPS reduces computational duration and conserves time and resources. GPS constitutes a method for solving malignant problems. This method has been leveraged to solve the one-dimensional advection-dispersion equation with variable coefficients. This method is based on solving dynamic systems in positive and negative time intervals and deriving a general equation to solve ordinary differential equations in a one-step approach. In this study, three examples are shown to demonstrate the performance of the one-step solution of the direct and inverse Group Preserving Scheme. First, the pollutant concentration in the river was calculated using the forward solution with variable coefficients. Next, two different examples were used to simulate the pollutant intensity function at the initial time, employing the Backward Group Preserving Scheme. Afterward, the accuracy of the one-step and multi-step solutions was evaluated using statistical indicators.

Cite this article: Saadat, A. M., & Mazaheri, M. (2024) Using one-step group preserving schemes for contaminant transport modeling in rivers, *Iranian Journal of Soil and Water Research*, 54 (11), 1627-1646. <https://doi.org/10.22059/ijswr.2023.365226.669572>

© The Author(s).

Publisher: The University of Tehran Press.

DOI: <https://doi.org/10.22059/ijswr.2023.365226.669572>



استفاده از طرح حافظ گروه تکمرحله‌ای در انواع مدل‌سازی انتقال آلودگی در رودخانهامیرمحمد سعادت^۱ | مهدی مظاهری^۲^۱. گروه مهندسی و مدیریت آب، دانشکده کشاورزی، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران رایانامه: a.saadat@modares.ac.ir^۲. نویسنده مسئول، گروه مهندسی و مدیریت آب، دانشکده کشاورزی، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران. رایانامه: m.mazaheri@modares.ac.ir

اطلاعات مقاله	چکیده
نوع مقاله: مقاله پژوهشی	افزایش نگرانی‌های زیست‌محیطی در سال‌های اخیر، توسعه مدل‌های رایانه‌ای را که پراکندگی آلاینده‌ها در سیستم‌های آب طبیعی را پیش‌بینی می‌کنند، به یک ضرورت مطلق تبدیل کرده است. جذابیت اصلی این‌گونه مدل‌ها برخلاف مدل‌های فیزیکی، کم‌هزینه بودن و سهولت سازگاری با شرایط جدید است. به‌منظور حل معادله انتقال آلودگی در رودخانه به‌صورت مستقیم و معکوس از طرح حافظ گروه بهره گرفته شده است. از آنجاکه شبیه‌سازی هر چه سریع‌تر تابع شدت آلاینده بسیار حائز اهمیت است، پیدا کردن روشی که بتواند این مهم را محقق کند از اهمیت زیادی برخوردار است. حل معادله انتقال آلودگی با یک گام زمانی با استفاده از طرح حافظ گروه باعث کاهش زمان محاسبات و صرفه‌جویی در زمان و هزینه می‌شود. طرح حافظ گروه به‌عنوان روشی جهت حل مسائل بسیار پیچیده است. در این پژوهش از این روش برای حل معادله یک‌بعدی جابه‌جایی-پراکندگی با ضرایب متغیر، بهره گرفته شده است. اساس این روش، حل سیستم‌های دینامیکی در گام‌های زمان مثبت و منفی و به‌دست آوردن یک معادله کلی جهت حل معادلات دیفرانسیل معمولی به‌صورت تک‌مرحله‌ای است. در این پژوهش سه مثال جهت نشان دادن عملکرد حل تک‌مرحله‌ای طرح مستقیم و معکوس حافظ گروه ارائه شده است. ابتدا با استفاده از حل مستقیم مقدار غلظت آلاینده در رودخانه با ضرایب متغیر محاسبه شده است. در گام بعد با دو مثال مختلف با استفاده از طرح معکوس حافظ گروه به شبیه‌سازی تابع شدت آلاینده در زمان ابتدایی پرداخته می‌شود و پس از شبیه‌سازی، دقت حل تک‌مرحله‌ای و چندمرحله‌ای با استفاده از شاخص‌های آماری مورد ارزیابی قرار می‌گیرد.
تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۶/۲۲	
تاریخ بازنگری: ۱۴۰۲/۸/۲۷	
تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۹/۱	
تاریخ انتشار: ۱۴۰۲/۱۱/۱	
واژه‌های کلیدی: تشخیص منابع آلاینده، حل عددی، روش معکوس، طرح حافظ گروه تک‌مرحله‌ای، معادله جابه‌جایی-پراکندگی.	

استناد: سعادت، امیرمحمد؛ مظاهری، مهدی. (۱۴۰۲). استفاده از طرح حافظ گروه تک‌مرحله‌ای در انواع مدل‌سازی انتقال آلودگی در رودخانه، *مجله تحقیقات آب و خاک*ایران، ۵۴ (۱۱)، ۱۶۴۶-۱۶۲۷. <https://doi.org/10.22059/ijswr.2023.365226.669572>

© نویسنده‌گان.

ناشر: مؤسسه انتشارات دانشگاه تهران.

DOI: <https://doi.org/10.22059/ijswr.2023.365226.669572>

مقدمه

کمبود منابع آب و آلودگی آن‌ها به چالش‌های جدی برای زندگی انسان و موجودات زنده تبدیل شده است (Alulema-Pullupaxi et al., 2021). اقدامات قانونی برای کنترل و تخلیه آلودگی به منابع آب از جمله رودخانه‌ها صورت گرفته است، اما تنها با اعمال قوانین نمی‌توان به‌طور کامل جلوی آلودگی آب را گرفت. علاوه بر این، وجود خلل‌ها در نظارت و نبود قدرت محاسباتی و کنترلی عملی در این زمینه، آلودگی بیشتر منابع آب، به‌ویژه رودخانه‌ها را سبب شده است (C.-Y. Chang et al., 2019; Godwin et al., 2015; Yuan et al., 2022). یکی از مهم‌ترین عوامل انتقال آلودگی به رودخانه‌ها صنایع و کارخانه‌ها هستند به همین منظور وجود یک سامانه کنترلی جهت تشخیص مکان و غلظت ورودی رودخانه ضروری است (Nikinmaa, 2014). به همین دلیل تشخیص زمان و مکان آلودگی در کوتاه‌ترین زمان ممکن می‌تواند کمک شایانی در مدیریت مسائل محیط زیستی انجام دهد (Crooks & Isakov, 2013; Jiang et al., 2021). علاوه بر این شبیه‌سازی غلظت آلاینده در پایین دست رودخانه با استفاده از روش‌های مستقیم، روند تغییرات الگوی آلاینده در مسیر رودخانه را نشان می‌دهد که باعث تسهیل در تصمیم‌گیری مسائل محیط زیستی می‌شود (Fardadi Shilsar et al., 2023; Guo & Cheng, 2019; Tsuzuki, 2015).

معادلات دیفرانسیل نقش مهمی در زمینه‌های مختلف علوم، مهندسی و ریاضیات دارند و مدل‌های ریاضی را برای توصیف سیستم‌ها و پدیده‌های دینامیکی ارائه می‌کنند (Kato et al., 2023; Ma, 2022; Rockne et al., 2019). این معادلات اغلب شامل عبارات ریاضی پیچیده‌ای است که نمی‌توان آن‌ها را به‌صورت تحلیلی حل کرد و استفاده از روش‌های عددی برای به دست آوردن جواب معادلات ضروری می‌کند (Gnudi, 2023; Nave et al., 2021). معادله جابه‌جایی - پراکندگی که از این دسته معادلات است یک مدل ریاضی رایج است که راه‌حل آن می‌تواند بینش‌های ارزشمندی را در مورد فرآیندهای مهم مانند آلودگی آب‌های زیرزمینی و کیفیت آب در رودخانه‌ها ارائه دهد (Paladino et al., 2018; Parker & Kim, 2015; Singh et al., 2023). تحقیقات گسترده‌ای بوده است (Ibiş & Bayram, 2014; Seifi & Riahi-Madvar, 2019; Tressler & Uchrin, 2014; Zhou et al., 2016). با این حال کاهش زمان محاسبات در حل عددی معادلات دیفرانسیل یک امر مهم تلقی شده است. یکی از راه‌های دستیابی به جواب‌های سریع، تعیین وضوح عددی^۱ معادلات دیفرانسیل است که در واقع به سطح جزئیات یا دقت محاسبات توجه دارد (Wu et al., 2019). دستیابی سریع به جواب در وضوح عددی معادلات دیفرانسیل به دلیل تأثیر آن بر دقت و سرعت حل‌های عددی بسیار مهم است (Ali, 2021; Conrad et al., 2017). تغییرات گام زمانی در وضوح عددی معادلات دیفرانسیل می‌تواند بر دقت و سرعت حل‌های عددی تأثیر بگذارد (Conrad et al., 2017; Zarif Sanayei et al., 2021). این تغییرات به انتخاب بازه‌های زمانی اشاره دارد که این تغییرات می‌توانند بر دقت حل عددی تأثیر بگذارند (Woolway et al., 2020). به‌طور خاص، تئوری لاکس^۲ رابطه‌ای بین مقدار گام زمانی و گام مکانی شبکه محاسباتی برقرار می‌کند که با برآوردن نیازهای پایداری و ثبات، همگرایی حل عددی را به جواب دقیق نزدیک می‌کند در نتیجه اهمیت دستیابی سریع به جواب در وضوح عددی معادلات دیفرانسیل در توانایی آن در ارائه راه‌حل‌های دقیق و کارآمد نهفته است (Chartres et al., 2021). H. Wang et al., 2021; Vitanov, 2022; Ojo et al., 2021; Stepleman, 1972. & به منظور افزایش بازدهی مدل‌های عددی توصیه می‌شود که گام زمانی به حداکثر مقدار ممکن انتخاب شود تا فرآیند حل بهبود یابد. با این وجود، این انتخاب به دلیل محدودیت‌های پایداری که توسط معیار CFL^۳ تعیین می‌شود، محدود است. این ممکن است در برخی از روش‌ها با افزایش غیرطبیعی گام زمانی، ناپایداری عددی در راه‌حل ایجاد شود که ممکن است منجر به نتایج نادرست و غیرقابل اعتمادی شود (Glenis et al., 2013; Nichols & Heikkinen, 2006). با توجه به اهمیت گام زمانی در حل‌های عددی، در پژوهش‌های مختلفی میزان تأثیر این پارامتر بر دقت و سرعت مدل‌های عددی نشان داده شده است که در همین راستا می‌توان به تحقیقات نایبل و همکاران در سال ۲۰۱۴، هاروی و همکاران در سال ۲۰۱۶، فارست و همکاران در سال ۲۰۱۱، سنتوس و همکاران در سال ۲۰۱۸، جانسن و همکاران در سال ۲۰۰۲ و بارمن و همکاران در سال ۲۰۰۹ اشاره کرد که این تحقیقات به‌طور کلی کاهش دقت و افزایش سرعت مدل با کاهش تعداد گام زمانی را نشان می‌دهند. (Burman & Fernández, 2009; Fürst et al., 2011; Harvey & Versegny, 2016; Johnson et al., 2002; Nobile et al., 2014; Santos et al., 2018). جهت بازسازی الگوی آلاینده در رودخانه‌ها می‌توان از راه‌حل‌های معکوس بهره گرفت (Lu & Yu, 2019). حل معکوس معادله

¹ Numerical resolution

² lax theorem

³ Courant-Friedrichs-Lewy



انتقال آلودگی در رودخانه‌ها و آب‌های زیرزمینی به روش‌های کلی شبیه‌سازی-بهبینه‌سازی، احتمالاتی و زمین‌آماری و ریاضی مورد بررسی قرار گرفته‌اند (Mazaheri et al., 2015). در روش شبیه‌سازی-بهبینه‌سازی، از ترکیب الگوریتم بهبودیافته‌سازی و روش عددی برای حل معکوس معادله انتقال آلودگی استفاده می‌شود. این روش به کامپیوترهای با پردازنده قوی نیاز دارد که همراه با افزایش هزینه و زمان محاسبات می‌آید. این روش به‌خوبی با محیط‌های بزرگ متناسب است. در این راستا، در سال ۲۰۱۵، ناردو و همکاران با استفاده از روش تنظیم حداقل مربعات و اطلاعات حسگرهای زیستی، به شبیه‌سازی زمان و مکان آلودگی در محیط یک‌بعدی پرداختند (Nardo et al., 2015). همچنین، در سال‌های ۲۰۱۷ و ۲۰۰۵ و ۲۰۰۶، ژانگ و ژین، مهینتاکومار و سعید، و داتا و سینگ با استفاده از این روش تابع شدت زمانی آلاینده را بازسازی کردند (Kumar & Mohamed, 2005; Mohan & Bithin, 2006; S. Zhang & Xin, 2017).

در روش دیگر، از روش‌های احتمالاتی و زمین‌آماری برای شبیه‌سازی مکان و زمان غلظت آلاینده استفاده می‌شود. این روش مزایا و معایب خود را دارد، که می‌توان به کاهش حجم محاسبات و محدودیت در شناسایی تعداد منابع آلاینده اشاره کرد. در سال ۲۰۱۶، قانع و همکاران با استفاده از روش احتمال برگشتی، مکان و زمان انتشار منابع آلاینده را به دست آوردند و عملکرد موفقی در تشخیص زمان و مکان آلاینده در رودخانه داشتند (Ghane et al., 2016). همچنین، در سال ۲۰۱۰، چنگ و جیا با استفاده از این روش و با شرایط جریان غیریکنواخت و ماندگار در محیط دوبعدی، محل و زمان رهاسازی ماده آلاینده در رودخانه را تشخیص دادند و با داده‌های واقعی این روش را تأیید کردند (Cheng & Jia, 2010). همچنین، در سال‌های ۲۰۰۵، ۲۰۱۴ و ۲۰۱۸، نیوپار و ویلسون، کاپولا و همکاران، و وانگ و همکاران به ترتیب با روش‌های احتمالات برگشتی، زمین‌آماری، و ترکیب احتمال برگشتی و مدل رگرسیون خطی تحقیقاتی انجام دادند (Cupola et al., 2015; Neupauer & Wilson, 2005; Roohollah et al., 2016; J. Wang et al., 2018).

در روش سوم، از چارچوب‌های ریاضی برای شبیه‌سازی استفاده می‌شود. این روش نسبت به روش شبیه‌سازی-بهبینه‌سازی دارای مزایایی مانند کاهش زمان محاسبات، کاهش تعداد دفعات اجرا مدل و حذف تکرارها است. با این حال، پیچیدگی حل مسئله در این روش ریاضی، با چالش‌هایی همراه است. برای حل معکوس معادله انتقال آلودگی، از روش‌های مختلفی از جمله حل معکوس با استفاده از روش شبه معکوس-پذیری استفاده شده است. در سال ۲۰۱۹، لوشابی و همکاران با استفاده از این روش، به حل معکوس معادله یک‌بعدی جابه‌جایی-پراکندگی با ضرایب متغیر پرداختند. این تحقیق با استفاده از یک مدل عددی، داده‌های سری زمانی غلظت آلاینده تخلیه‌شده در رودخانه را محاسبه و بازسازی کرد (لوشابی و همکاران، ۱۳۹۸). همچنین، در پژوهشی دیگر در سال ۲۰۲۱، پرمون و مظاهری با افزودن ترم پایداری به معادله انتقال آلودگی و با استفاده از روش شبه معکوس-پذیری، به حل معادله انتقال آلودگی پرداختند (پرمون و مظاهری، ۱۳۹۹). در تحقیقات دیگر نیز از روش‌های شبیه معکوس-پذیری برای حل معکوس معادله انتقال آلاینده استفاده شده است. به‌عنوان مثال، اسکاگاس و کابالا در سال ۱۹۹۵، ژانگ و وانگ در سال ۲۰۱۱ با استفاده از این روش به حل معکوس معادله انتقال آلاینده پرداختند (Skaggs & Kabala, 1995; T. Zhang et al., 2011). روش‌های دیگری نیز برای حل معکوس معادله انتقال آلاینده در رودخانه به کار رفته‌اند که شامل روش‌های عددی و تحلیلی مانند تنظیم تابع گرین، تیخنوف، تبدیل لاپلاس و غیره است. به‌عنوان مثال، نیوپار و همکاران در سال ۲۰۰۰ با استفاده از روش تیخنوف، و مظاهری و همکاران در سال ۲۰۱۵ با استفاده از معادله انتگرالی حاصل از اعمال روش تابع گرین به شبیه‌سازی مکان و زمان آلاینده در رودخانه پرداختند (Mazaheri et al., 2015; Neupauer et al., 2000; Skaggs & Kabala, 1995; T. Zhang et al., 2011).

همان‌طور که گفته شد تعیین تعداد گام زمانی بر دقت، زمان شبیه‌سازی و همگرا یا واگرا شدن مدل اثر می‌گذارد اما این میزان تأثیرپذیری بر روش‌های عددی مختلف متفاوت است (Manson et al., 2000; Rodman & Martin, 2020; Xing et al., 2019). به این منظور در این پژوهش روشی انتخاب شده است که توانایی حل معادله انتقال آلودگی با یک گام زمانی دارد. در این پژوهش با استفاده از یک طرح عددی، بر مبنای چارچوب‌های ریاضی، حل ADE به‌صورت معکوس در زمان ارائه شده است. این روش بر اساس روش خطوط است که با استفاده از این روش می‌توان معادلات با مشتقات جزئی را به معادلات دیفرانسیل معمولی تبدیل کرد (C. S. Liu et al., 2010; Pregla & Pascher, 1989). گروه تبدیلات لی برای دستگاه دینامیک تقویت‌شده در مخروط آینده به دست آمده است و طرح حافظ گروه (GPS) جهت محاسبه عددی مؤثر معادلات دیفرانسیل غیرخطی توسعه داده شده است (C. S. Liu, 2001). GPS جهت انتگرال‌گیری از معادلات دیفرانسیل غیرخطی ارائه شده است که از مختصات همگن و دینامیک در فضای تقویت‌شده مینکوفسکی برای توسعه روش‌های عددی استفاده شده است. تفاوت اساسی GPS و روش‌های عددی دیگر این است که در روش‌های قبلی از فضای اقلیدسی R^n استفاده می‌شود در حالی که در GPS از فضای مینکوفسکی M^{n+1} استفاده می‌شود در واقع بعد دستگاه در فضای مینکوفسکی یک مرتبه افزایش

می‌یابد که این امر باعث اجتناب از جواب‌های جعلی و نقاط ثابت غیر واقعی می‌شود (C. S. Liu, 2001). برای حل معادلات به صورت معکوس در زمان توسط طرح معکوس حافظ گروه (BGPS)، گسترش کار با در نظر گرفتن معکوس زمان معادلات با هدف ساخت نظریه گروه معکوس انجام می‌شود. طرح‌های عددی اتخاذ شده برای مسائل معکوس عموماً ضمنی است. طرح‌های صریحی که برای حل مسائل معکوس به کار گرفته شده است تاکنون چندان مؤثر نبوده است (C. S. Liu, 2006). از آنجا که عموم حل مسائل معکوس به حل یک دستگاه معادلات خطی از نوع مسئله بدوضع^۱ منجر می‌شود، حل با استفاده از روش‌های عددی کلاسیک غیرممکن است و نیاز به تکنیک‌های ویژه‌ای جهت حل آن‌ها هست (Ames & Epperson, 1997). از این رو با استفاده از (BGPS) به حل معکوس معادله انتقال آلاینده در رودخانه به صورت معکوس در زمان پرداخته می‌شود. تاکنون استفاده از این روش در حل مسائل مختلف انجام شده است که می‌توان به حل مستقیم و معکوس معادلات گرما، برگرز، ADE در آب‌های زیرزمینی، کلاین-گوردون، مسائل موج و مسئله کوشی اشاره کرد (C.-W. Chang, 2010; C. Chang et al., 2009; C. W. Chang & Kuo, 2014; C. W. Chang & Liu, 2014; Chen, 2016; Gao et al., 2019; C.-S. Liu, 2006; C.-S. Liu & Chang, 2012; C. S. Liu, 2004, 2006; C. S. Liu et al., 2006, 2010). با توجه به پژوهش‌های صورت گرفته، سرعت بازسازی تابع شدت آلاینده از اهمیت بسیار زیادی برخوردار است. یکی از عوامل مؤثر بر سرعت شبیه‌سازی تعیین تعداد گام زمانی است. با این حال در بسیاری از روش‌ها به دلیل شرایط پایداری و واگرا شدن نتایج امکان کم کردن بیش از اندازه گام زمانی وجود ندارد اما در طرح حافظ گروه به دلیل مجزا در نظر گرفتن بعد زمان در قالب فضای $n+1$ بعدی این امکان وجود دارد تا بدون واگرا شدن نتایج، با یک گام زمانی شبیه‌سازی مستقیم و معکوس معادله انتقال آلودگی را انجام داد که می‌تواند ابزار پیشرفت در مسائل محیط زیستی را فراهم کند. در واقع هدف از انتخاب این روش کاهش زمان شبیه‌سازی، ساده‌تر شدن معادلات و به تبع کاهش هزینه‌های محاسباتی است. از مزیت‌های دیگر این روش می‌توان به عدم نیاز به انتخاب و بهینه‌سازی ترم پایداری اشاره کرد.

مبانی تئوری و روش‌ها

در این مطالعه، از طرح حافظ گروه، که بر پایه گروه‌های لی^۲ است، برای حل مستقیم و معکوس معادله انتقال آلودگی در رودخانه استفاده شده است. در ابتدا، طرح حافظ گروه برای حل تک‌مرحله‌ای^۳ مستقیم معادله انتقال آلودگی معرفی شده و سپس به توضیح تک‌مرحله‌ای طرح معکوس حافظ گروه برای حل یک گام معکوس این معادله پرداخته می‌شود. در نهایت، معادله جابه‌جایی-پراکندگی به صورت مستقیم و معکوس با استفاده از این روش به صورت تک‌مرحله‌ای و چندمرحله‌ای^۴ حل می‌شود و دقت این دو حل با جواب دقیق سنجیده شده است. در ابتدا پس از شبیه‌سازی مدل مستقیم با استفاده از شرط اولیه، شرط انتهایی توسط روش مستقیم حاصل می‌شود که به عنوان الگوی ورودی مدل معکوس اتخاذ می‌شود. مدل معکوس با هدف بازسازی شرط اولیه (الگو غلظت ورودی رودخانه) شبیه‌سازی می‌شود. با مقایسه روش معکوس و مستقیم که یکی از روش‌های متداول جهت صحت‌سنجی مدل معکوس است، صحت‌سنجی روش معکوس انجام می‌گیرد (Atmadja and Bagtzoglou, 2001; El Badia et al., 2005; Lee et al., 2018; W. Wang et al., 2023). در حل معکوس منظور از دقیق الگو ورودی رودخانه است که باهدف بازسازی این الگو توسط مدل تک‌مرحله‌ای و مقایسه عملکرد آن با روش چندمرحله‌ای شبیه‌سازی انجام گرفته است. در مدل مستقیم نتایج با حل نیمه تحلیلی معادله جابه‌جایی-پراکندگی که جزئیات این روش در مقاله فردادی و همکاران آورده شده است مورد ارزیابی قرار گرفته است (Fardadi Shilsar et al., 2023) (فردادی شیل سر و همکاران ۱۴۰۰؛ فردادی شیل سر و همکاران ۱۴۰۰).

در این پژوهش، ابتدا با استفاده از روش عددی مستقیم، معادله انتقال آلودگی در یک بعد حل می‌شود و سپس نتایج به دست آمده به عنوان ورودی برای مرحله دوم محاسبات (حل معکوس معادله انتقال آلودگی) استفاده می‌شود تا نتایج نهایی (تابع شدت آلاینده) محاسبه گردد. در این مطالعه، برای مدل‌سازی انتقال و انتشار آلاینده در رودخانه، به کمک طرح حافظ گروه که رودخانه به n بازه تقسیم می‌شود، پرداخته شده است (سعادت و همکاران، ۱۴۰۱). در این روش، طول هر بازه رودخانه با $L_1, L_2, \dots, L_{n-1}, L_n$ نشان داده شده است. همان‌طور که از شکل ۱ پیداست غلظت آلاینده از بالادست به پایین دست حرکت می‌کند و در حل مستقیم تک‌مرحله‌ای از t_1 به t_2 و در حل معکوس از t_2 به t_1 تغییر می‌کند. این روش مدل‌سازی به صورت معکوس انجام می‌شود، به این معنا که با داشتن الگوی غلظت در زمان انتهایی

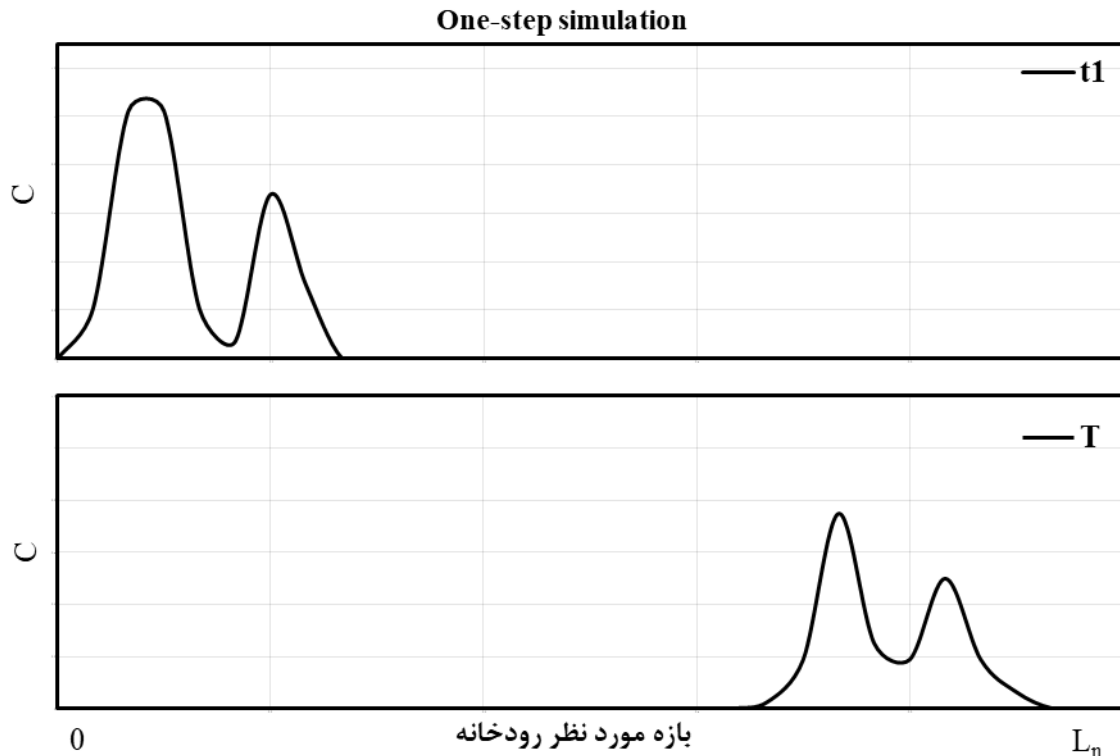
¹ Ill-posed problem

² Lie groups

³ One-step

⁴ Multi-step

(پروفیل مکانی در زمان T)، شبیه‌سازی غلظت در زمان ابتدایی انجام می‌شود. استخراج پروفیل مکانی در زمان انتهایی نیازمند داده‌برداری در طول رودخانه است، اما در این پژوهش به دلیل نداشتن داده‌های واقعی، از حل مستقیم معادله انتقال آلودگی استفاده می‌شود.



شکل ۱. نیمرخ مکانی غلظت آلاینده در رودخانه در بازه 0 تا L_n

معادله انتقال آلودگی در رودخانه

در تحقیق حاضر معادله جابه‌جایی-پراکندگی به صورت یک‌بعدی به صورت زیر بررسی می‌گردد (Chapra, 2008):

$$\frac{\partial(AC)}{\partial t} = -\frac{\partial(QC)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(AD \frac{\partial C}{\partial x} \right) - AkC + AS \quad (\text{رابطه ۱})$$

در معادله (۱)، A سطح مقطع رودخانه D ضریب پراکندگی در جهت طولی، k ضریب زوال ماده آلاینده و S ترم منبع است. از آنجا که معادله جابه‌جایی-پراکندگی از دسته معادلات دیفرانسیل جزئی هست، از روش عددی خطوط^۱ برای تبدیل این معادله به یک دستگاه معادلات دیفرانسیل معمولی استفاده می‌شود. پس از انجام گسسته‌سازی بر معادله اصلی، معادله زیر به دست می‌آید که با نماد f_j نمایش داده می‌شود.

$$f_j = \frac{d[A_i C_i(t)]}{dt} = -\frac{Q_{i+1}(t)C_{i+1}(t) - Q_{i-1}(t)C_{i-1}(t)}{2\Delta x} + \frac{1}{\Delta x} \left[\left(AD \frac{\partial C}{\partial x} \right)_{i+1} - \left(AD \frac{\partial C}{\partial x} \right)_{i-1} \right] - A_i k_i C_i + A_i S_i \quad (\text{رابطه ۲})$$

گفتنی است که در این مسئله از ضریب زوال واکنش و ترم منبع صرف‌نظر شده است. شرایط مرزی و انتهایی برای حل عددی معکوس معادله جابه‌جایی-پراکندگی در رودخانه به صورت زیر تعیین شده‌اند.

که $C_T(x)$ شرط انتهایی توزیع مکانی غلظت مشاهده‌شده در زمان T در رودخانه‌ای به طول L است.

$$\begin{aligned} C(0, t) &= 0 & 0 \leq t \leq T \\ \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{x=L} &= 0 & 0 \leq t \leq T \\ C(x, t) &= C_T(x) & 0 \leq x \leq L \end{aligned} \quad (\text{رابطه ۳})$$

^۱ The numerical method of lines

در این تحقیق از حل معادلات سنت و نانت جهت محاسبه پارامترهای جریان استفاده شده است. که حالت کلی این معادلات به شرح زیر است:

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{Q^2}{A^2} \right) + gA \frac{\partial z_w}{\partial x} + gAS_f = 0 \quad (۴)$$

که در روابط فوق Q دبی جریان، A سطح مقطع جریان، g شتاب ثقل، S_f شیب خط انرژی، t زمان، x فاصله طولی در جهت جریان و z_w تراز سطح آب است.

با توجه به وابستگی ضریب پراکندگی به عوامل هیدرودینامیکی، هندسه رودخانه و خصوصیات سیال، تعیین دقیق این ضریب با چالش مواجه است (Toprak et al., 2004). با توجه به این موارد، به منظور تخمین ضریب پراکندگی طولی در رودخانه، می‌توان از فرمول‌هایی که توسط محققین مختلف تبیین شده‌اند، استفاده نمود (Karami Cheme and Mazaheri, 2021). در این پژوهش از رابطه تجربی و پرکاربرد فیشر استفاده شده است (Fischer et al., 1979).

پس از محاسبه پارامترهای جریان و انجام گسسته‌سازی بر معادله (۱) با استفاده از روش خطوط، حل تک‌مرحله‌ای معادله انتقال آلودگی در رودخانه انجام می‌شود. روش خطوط با اعمال گسسته‌سازی بر معادلات دیفرانسیل جزئی، این معادلات را به یک دستگاه معادلات دیفرانسیل معمولی تبدیل می‌کند و سپس با استفاده از حل عددی، به حل آن پرداخته می‌شود (سعادت و همکاران، ۱۴۰۱). در طرح حافظ گروه، از فضای مینکوفسکی^۱ برای حل معادلات بهره گرفته می‌شود. این روش تفاوت اصلی با سایر روش‌های عددی دارد، به این صورت که به جای استفاده از فضای اقلیدسی R^n ، از فضای مینکوفسکی M^{n+1} استفاده می‌کند. این تغییر باعث می‌شود که بعد دستگاه در فضای مینکوفسکی یک مرتبه افزایش یابد. استفاده از فضای مینکوفسکی دارای مزیتی مهم است، که اجتناب از جواب‌های جعلی^۲ و نقاط ثابت غیرواقعی^۳ را در برمی‌گیرد (C. S. Liu, 2001).

حل مستقیم با استفاده از طرح حافظ گروه

برای دستگاه معادلات دیفرانسیل n بعدی به صورت زیر:

$$\dot{\mathbf{C}} = \mathbf{f}(\mathbf{C}, t), \quad \mathbf{C} \in R^n, \quad t \in R^+ \quad (۵)$$

می‌توان سیستم‌های معادلات دیفرانسیل غیرخطی را در دستگاه‌های دینامیکی تقویت‌شده جای داد و سپس معادله بالا را به یک دستگاه دینامیکی افزوده $n+1$ بعدی تبدیل کرد (C. S. Liu, 2001):

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \mathbf{C} \\ \|\mathbf{C}\| \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{n \times n} & \frac{\mathbf{f}(\mathbf{C}, t)}{\|\mathbf{C}\|} \\ \frac{\mathbf{f}^T(\mathbf{C}, t)}{\|\mathbf{C}\|} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{C} \\ \|\mathbf{C}\| \end{bmatrix} \quad (۶)$$

که در معادلات فوق \mathbf{C} بردار n بعدی است، t یک متغیر زمانی است \mathbf{f} تابعی برداری نامیده می‌شود. همان‌طور که مشخص است قسمت اول معادله (۶) همان مقدار معادله (۵) است اما قسمت دوم معادله ساختار را برای متغیرهای افزوده $\mathbf{X} := (\mathbf{C}^T, \|\mathbf{C}\|)^T$ ایجاد می‌کند که در شرط مخروط مینکوفسکی صدق می‌کند.

$$\mathbf{X}^T \mathbf{g} \mathbf{X} = 0 \quad (۷)$$

که \mathbf{g} یک متر مینکوفسکی^۴ است و برابر است با:

^۱ Minkowski

^۲ Spurious

^۳ Ghost fixed points

^۴ Minkowski metric

$$\mathbf{g} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_n & \mathbf{0}_{n \times 1} \\ \mathbf{0}_{1 \times n} & -1 \end{bmatrix} \quad \text{رابطه ۸}$$

در معادلات فوق، \mathbf{I}_n تابع همانی از مرتبه n و T نمایانگر ترانهاده است. با بهره‌گیری از معادله (۷)، دامنه جواب در فضای مینکوفسکی مشخص می‌شود. با منظور کردن زمان مثبت جهت تعیین دامنه جواب در حل مستقیم و زمان منفی جهت تعیین دامنه جواب در حل معکوس و تشکیل مخروط پوچ^۱ که از حل معادله (۷) به دست آمده است، مخروط به دو بخش که به آن‌ها مخروط آینده^۲ و مخروط گذشته^۳ تقسیم می‌شود. این واقعیت باعث تشکیل دامنه جواب حل معادله انتقال آلودگی در رودخانه در فضای مینکوفسکی می‌شود. در نتیجه با محدودیت ایجادشده (معادله ۷) یک سیستم تقویت‌شده $n+1$ به شکل زیر ایجاد می‌شود:

$$\dot{\mathbf{X}} = \mathbf{A} \mathbf{X} \quad \text{رابطه ۹}$$

که در معادله فوق \mathbf{A} یک عنصر از جبر لی^۴ است.

$$\mathbf{A} := \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{n \times n} & \frac{\mathbf{f}(\mathbf{C}, t)}{\|\mathbf{C}\|} \\ \frac{\mathbf{f}^T(\mathbf{C}, t)}{\|\mathbf{C}\|} & 0 \end{bmatrix} \quad (10)$$

در فضای معمول اقلیدسی R^n ، می‌توان سیستم دینامیکی اصلی n بعدی (۵) را به‌طور طبیعی در یک سیستم دینامیکی $n+1$ بعدی (۹) در فضای مینکوفسکی M^{n+1} ، غوطه‌ور کرد. سیستم جدید، بهره‌مندی از طرح عددی حافظ گروه را دارد که به شرح زیر آمده است (S. Liu et al., 2010).

$$\mathbf{C}_{j+1} = \mathbf{G}(j) \mathbf{C}_j \quad \text{رابطه ۱۱}$$

که در معادله فوق \mathbf{C}_{j+1} غلظت در زمان $j+1$ و \mathbf{C}_j غلظت در زمان j و با توجه به خواص طرح حافظ گروه $\mathbf{G}(j) \in SO_0(n, 1)$ ارزیابی گروه در زمان j است.

حل مستقیم تک‌مرحله‌ای معادله انتقال آلودگی در رودخانه

با شروع از یک شرط ابتدایی \mathbf{C}_0 ، سعی می‌شود مقدار \mathbf{C}_T که غلظت در زمان انتهایی است محاسبه شود. با فرض اینکه کل زمان T بر K مرحله تقسیم می‌شود، یعنی اندازه گام‌های زمانی $\Delta T = T/K$ است. با توجه به معادله (۱۱) می‌توان نوشت:

$$\mathbf{C}_T = \mathbf{G}_{T-1}(\Delta T) \dots \mathbf{G}_0(\Delta T) \mathbf{C}_0 \quad \text{رابطه ۱۲}$$

در معادله فوق هر $\mathbf{G}_i, i = 1, \dots, K$ یک عنصر از گروه لی است و با ویژگی‌های انتقالی گروه لی $\mathbf{G}_1(\Delta T) \dots \mathbf{G}_T(\Delta T)$ نیز عضو گروه لی هستند که با \mathbf{G} نمایش داده می‌شود. این یک انتقال تک‌مرحله‌ای از \mathbf{C}_0 به \mathbf{C}_T است. با فرض ثابت بودن ماتریس $\mathbf{A}(j)$ در معادله (۹) و مقدار گیری آن در یک مرحله، نوشتن نگاشت نمایی برای ماتریس $\mathbf{A}(0)$ در فاصله زمانی T معادله زیر را تصدیق می‌کند:

$$\mathbf{G}_0 = \exp[T \mathbf{A}(0)] = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_n + \frac{(a_F - 1)}{\|\mathbf{f}_0\|^2} \mathbf{f}_0 \mathbf{f}_0^T & \frac{b_F \mathbf{f}_0}{\|\mathbf{f}_0\|} \\ \frac{b_F \mathbf{f}_0^T}{\|\mathbf{f}_0\|} & a_F \end{bmatrix} \quad \text{رابطه ۱۳}$$

با استفاده از رابطه $\mathbf{f}_T = \mathbf{f}(\mathbf{C}_T, t_T)$ و با جایگذاری $\exp[T \mathbf{A}(0)]$ به جای $\mathbf{G}(j)$ در رابطه (۱۱) معادله زیر حاصل می‌شود (S. Liu et al., 2010).

^۱ Null cone
^۲ Future cone
^۳ Past cone
^۴ Lie algebra

$$C_T = C_0 + \frac{(a_F - 1)\mathbf{f}_0 \cdot C_0 + b_F \|C_0\| \|\mathbf{f}_0\|}{\|\mathbf{f}_0\|^2} \mathbf{f}_0 = C_0 + \eta_0 \mathbf{f}_0 \quad \text{رابطه ۱۴}$$

که در معادلات فوق C_T غلظت در زمان انتهایی و C_0 غلظت در زمان ابتدایی است.

$$b_F := \sinh\left(\frac{T\|\mathbf{f}_0\|}{\|C_0\|}\right) \quad \text{رابطه ۱۵}$$

$$a_F := \cosh\left(\frac{T\|\mathbf{f}_0\|}{\|C_0\|}\right) \quad \text{رابطه ۱۶}$$

حل معکوس با استفاده از طرح معکوس حافظ گروه

به منظور حل معادلات دیفرانسیل معمولی به صورت معکوس، از طرح معکوس حافظ گروه بهره گرفته می‌شود، معادله (۵) با گام‌های زمانی منفی در زمان حل به صورت معکوس حل می‌شود. بنابراین برای دستگاه معادلات دیفرانسیل n بعدی، معادله (۵) به شکل زیر به صورت معکوس نمایش داده می‌شود (C. S. Liu et al., 2006):

$$\dot{\mathbf{C}} = \mathbf{f}(\mathbf{C}, t), \quad \mathbf{C} \in R^n, \quad t \in R^- \quad \text{رابطه ۱۷}$$

با یک مقدار نهایی غلظت مشخص در $t = 0$ هدف بازیابی مقادیر گذشته غلظت در زمان گذشته $t < 0$ است. روش مستقیم، در سیستم‌های دینامیکی تقویت‌شده، معادلات غوطه‌ور می‌شوند. می‌توان معادله فوق را به یک دستگاه دینامیکی افزوده $n+1$ بعدی تبدیل کرد (C. S. Liu et al., 2010).

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \mathbf{C} \\ -\|\mathbf{C}\| \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{n \times n} & -\frac{\mathbf{f}(\mathbf{C}, t)}{\|\mathbf{C}\|} \\ -\frac{\mathbf{f}'(\mathbf{C}, t)}{\|\mathbf{C}\|} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{C} \\ -\|\mathbf{C}\| \end{bmatrix} \quad \text{رابطه ۱۸}$$

همان‌طور که مشاهده می‌شود اولین قسمت معادله (۱۷) همان معادله (۱۸) است اما قسمت دوم معادله ساختار را برای متغیرهای افزوده $\mathbf{X} := (\mathbf{C}^T, -\|\mathbf{C}\|)^T$ ایجاد می‌کند که در شرط قسمت منفی مخروط صدق می‌کند. با اعمال شرط گذشته مخروط مینکوفسکی یک سیستم تقویت‌شده $n+1$ به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\dot{\mathbf{X}} = \mathbf{B}\mathbf{X} \quad \text{رابطه ۱۹}$$

که با شرط مخروط مینکوفسکی \mathbf{B} یک عنصر از جبر لی است.

$$\mathbf{B} := \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{n \times n} & -\frac{\mathbf{f}(\mathbf{C}, t)}{\|\mathbf{C}\|} \\ -\frac{\mathbf{f}'(\mathbf{C}, t)}{\|\mathbf{C}\|} & 0 \end{bmatrix} \quad \text{رابطه ۲۰}$$

با توجه خواص طرح حافظ گروه:

$$C_{j-1} = \mathbf{G}(j)C_j \quad \text{رابطه ۲۱}$$

که در معادله فوق C_{j-1} غلظت در زمان $j-1$ و C_j غلظت در زمان j و $\mathbf{G}(j) \in SO_0(n, 1)$ ارزیابی گروه در زمان j است.

حل معکوس تکمرحله‌ای معادله انتقال آلودگی در رودخانه

با شروع از یک شرط نهایی C_T سعی می‌شود مقدار C_0 که غلظت در زمان ابتدایی است محاسبه شود. با فرض اینکه کل زمان T بر K مرحله تقسیم می‌شود، یعنی اندازه گام‌های زمانی $\Delta T = T / K$ است. با توجه به معادله (۲۱) می‌توان نوشت:

$$C_0 = \mathbf{G}_1(\Delta T) \dots \mathbf{G}_T(\Delta T) C_T \quad \text{رابطه ۲۲}$$

معادله فوق یک انتقال تک‌مرحله‌ای از C_T به C_0 است. با فرض ثابت بودن ماتریس $B(j)$ در معادله (۲۰) و مقدار گیری تک‌مرحله‌ای آن، نوشتن نگاشت نمایی برای ماتریس $B(j)$ در فاصله زمانی T معادله زیر را تصدیق می‌کند:

$$G_T = \exp[-T B(T)] = \begin{bmatrix} I_n + \frac{(a_B - 1)}{\|f_T\|^2} f_T f_T^T & \frac{b_B f_T}{\|f_T\|} \\ \frac{b_B f_T}{\|f_T\|} & a_B \end{bmatrix} \quad \text{رابطه (۲۳)}$$

با جایگذاری $\exp[-T B(T)]$ به جای $G(j)$ در رابطه (۲۱) معادله زیر حاصل می‌شود (C. S. Liu et al., 2010):

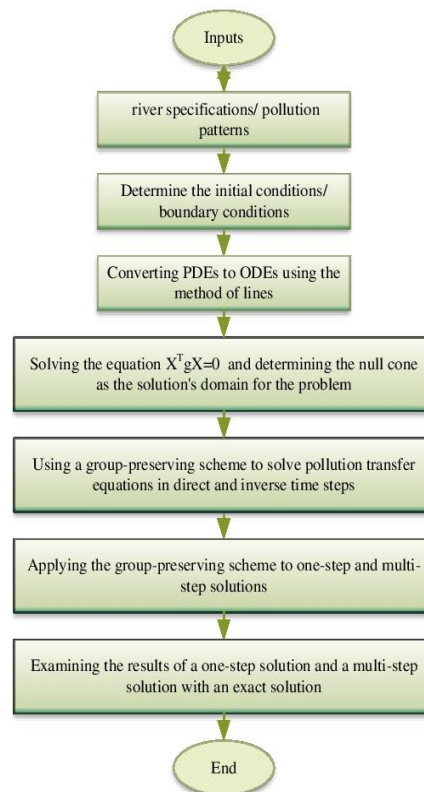
$$C_0 = C_T + \frac{(a_B - 1) f_T \cdot C_T + b_B \|C_T\| \|f_T\|}{\|f_T\|^2} f_T = C_T + \eta_T f_T \quad \text{رابطه (۲۴)}$$

که در معادلات فوق C_0 غلظت در زمان ابتدایی و C_T غلظت در زمان انتهایی است. a_B و b_B نیز به صورت زیر به دست می‌آید.

$$a_B := \cosh\left(\frac{T \|f_T\|}{\|C_T\|}\right) \quad \text{رابطه (۲۵)}$$

$$b_B := \sinh\left(\frac{T \|f_T\|}{\|C_T\|}\right) \quad \text{رابطه (۲۶)}$$

الگوریتم کلی حل تک‌مرحله‌ای معادله انتقال آلودگی به صورت مستقیم و معکوس به صورت زیر هست.



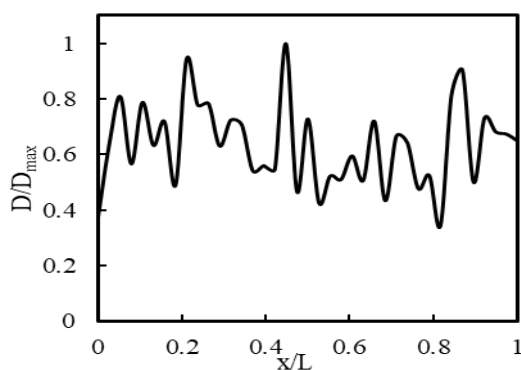
شکل ۲. فرآیند مدل‌سازی حل تک‌مرحله‌ای معادله انتقال آلاینده در رودخانه با ضرایب متغیر

نتایج و بحث

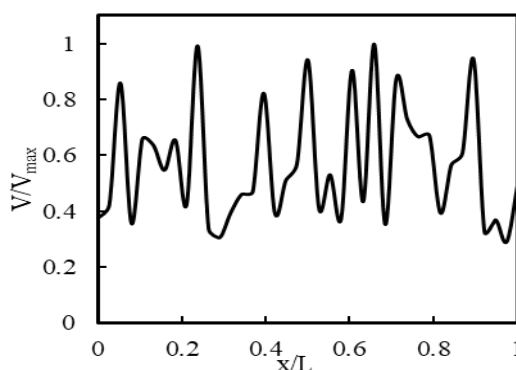
سه آزمون حالت جهت ارزیابی حل تکمرحله‌ای معادله انتقال آلودگی به صورت مستقیم و معکوس در زمان با استفاده از طرح حافظ گروه طراحی شده است. این سه آزمون حالت به منظور نشان دادن عملکرد روش تکمرحله‌ای و قیاس آن با روش چندمرحله‌ای نشان داده شده است. با توجه به این که در این پژوهش معادله انتقال آلودگی با ضرایب متغیر حل شده است، ابتدا باید پارامترهای جریان محاسبه شود که این پارامترها با حل معادلات جریان و با استفاده از مدل‌های موجود به دست آمده است. مشخصات رودخانه با توجه به آزمون حالت‌های واقعی در نظر گرفته شده است و با بهره‌گیری از معادله سنت و نانت، پارامترهای جریان محاسبه شده است. نتایج این محاسبات در شکل‌های ۳، ۴ و ۵ به ترتیب ارائه شده‌اند و همچنین مشخصات و پارامترهای مرتبط با هر آزمون حالت در جدول ۱ آورده شده است.

جدول ۱- مشخصات و پارامترهای هر آزمون حالت

هدف	ضرایب (جابه‌جایی- پراکنندگی)	نوع جریان	الگو آلاینده	طول L(km)	آزمون حالت
حل مستقیم/ ارزیابی روش تکمرحله‌ای در شبیه‌سازی پروفیل غلظت آلاینده در زمان انتهایی	متغیر	غیریکنواخت/ماندگار	مثلث تک قله	۱۵	آزمون حالت اول
حل معکوس/ ارزیابی روش تکمرحله‌ای در بازسازی پروفیل غلظت آلاینده در زمان ابتدایی	متغیر	غیریکنواخت/ماندگار	مثلث تک قله	۱۵	آزمون حالت دوم
حل معکوس/ ارزیابی روش تکمرحله‌ای در بازسازی پروفیل غلظت آلاینده در زمان ابتدایی با الگو پیچیده	متغیر	غیریکنواخت/ماندگار	مثلث دو قله	۱۵	آزمون حالت سوم

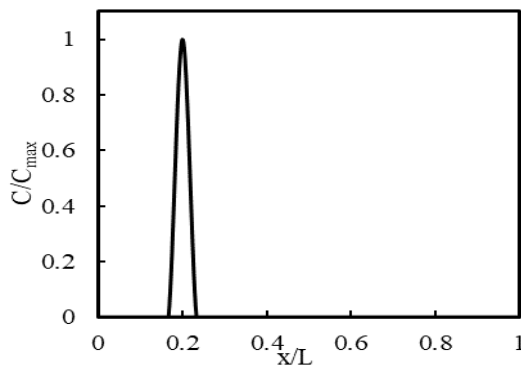


(الف)

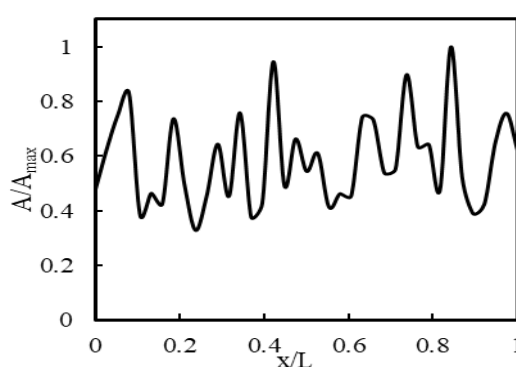


(ب)

شکل ۳. الف) تغییرات سرعت در راستای طولی رودخانه (ب) تغییرات ضریب پراکنندگی در راستای طولی رودخانه



(الف)



(ب)

شکل ۴. الف) تغییرات مساحت جریان در راستای طولی رودخانه (ب) منحنی سری مکانی غلظت آلاینده در زمان اولیه

ابتدا با حل مستقیم و تک‌مرحله‌ای طرح حافظ گروه و در نظر گرفتن پروفیل مکانی (شکل ۴ ب) به‌عنوان ورودی مدل، شبیه‌سازی انجام می‌شود و عملکرد روش تک‌مرحله‌ای نسبت به روش چندمرحله‌ای و حل دقیق مورد ارزیابی قرار می‌گیرد. به‌منظور شبیه‌سازی معکوس و تک‌مرحله‌ای معادله انتقال آلودگی نیاز به پروفیل مکانی در زمان انتهایی است. در همین راستا پس از انجام شبیه‌سازی با استفاده از مدل مستقیم، پروفیل مکانی در زمان انتهایی به‌عنوان ورودی مدل معکوس در نظر گرفته می‌شود و سپس پروفیل غلظت در زمان ابتدایی توسط روش تک‌مرحله‌ای و چندمرحله‌ای بازسازی می‌گردد. در انتها برای ارزیابی بهتر روش تک‌مرحله‌ای، از شاخص‌های خطای آماری نظیر ضریب همبستگی (R^2) جذر میانگین مربع خطاها (RMSE) میانگین خطای مطلق (MAE) و درصد خطای نسبی (MRE) استفاده شده است.

آزمون حالت اول: بررسی کاربرد روش تک‌مرحله‌ای و چندمرحله‌ای مستقیم با استفاده از طرح حافظ گروه در رودخانه

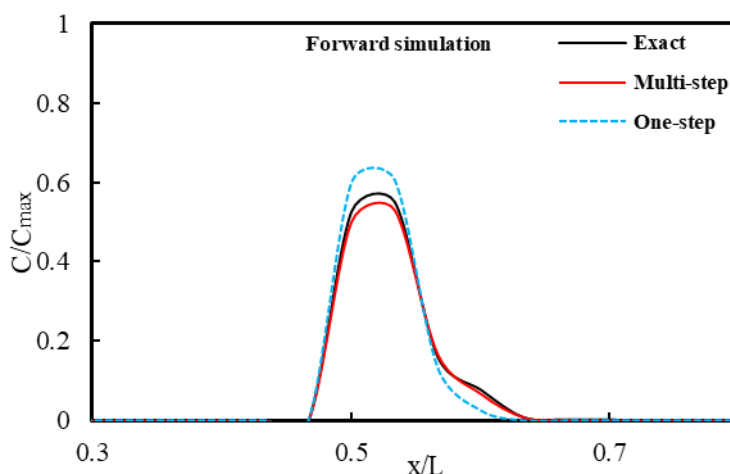
این آزمون حالت به‌منظور ارزیابی روش تک‌مرحله‌ای و مستقیم طراحی شده است. در این آزمون حالت الگو ورودی مدل به‌صورت پروفیل مکانی و مثلث تک قله در نظر گرفته شده است. زمان شبیه‌سازی ۱۲ ساعت و به دو صورت تک‌مرحله‌ای و چندمرحله‌ای نتایج مورد ارزیابی قرار گرفته است. همچنین نتایج ارزیابی روش تک‌مرحله‌ای و چندمرحله‌ای با استفاده از شاخص‌های آماری در جدول (۲) آورده شده است (Faraji & Mazaheri, 2022) (خداباشی امامی و مظاهری، ۱۴۰۱).

با توجه به شکل (۵) عملکرد روش چندمرحله‌ای در حل معادله انتقال آلودگی با ضرایب متغیر در رودخانه بسیار خوب بوده است و همان‌طور که از شکل ۵، معلوم است تطابق بالایی بین نتایج حاکم است. همان‌طور که در جدول (۲) نیز مشاهده می‌شود شاخص آماری نیز دقت بالای این روش را نشان می‌دهد. مقادیر بسیار کم MAE، RMSE و MRE و همچنین میل کردن مقدار R^2 به ۱ نشان‌دهنده دقت بالای روش چندمرحله‌ای را نشان می‌دهد.

همان‌طور که انتظار می‌رفت در روش تک‌مرحله‌ای از دقت مدل کاسته شده است. در شکل ۵، کاهش عملکرد مدل مشاهده می‌شود و همان‌طور که پیداست تطابق روش تک‌مرحله‌ای و نتیجه دقیق کم شده است و همچنین در جدول (۲) نیز مشاهده می‌شود دقت روش تک‌مرحله‌ای نسبت به چندمرحله‌ای کاهش داشته است. از آنجا که کاهش زمان محاسبات در شبیه‌سازی غلظت اهمیت ویژه‌ای در مسائل محیط زیستی دارد، می‌توان در مواردی که زمان در اولویت است از کاهش خطای ایجاد شده چشم‌پوشی کرد و به سرعت روند تغییرات غلظت در رودخانه را بررسی کرد.

جدول ۲. نتایج شاخص‌های آماری آزمون حالت اول

مقدار		شاخص آماری
روش تک‌مرحله‌ای	روش چندمرحله‌ای	
۰/۴۶	۰/۰۹	MAE(kg/m ³)
۹۵/۲۱	۹۸/۱۲	R ² (%)
۰/۲۰	۰/۰۵	RMSE(kg/m ³)
۸/۲۱	۰/۶۱	MRE(%)



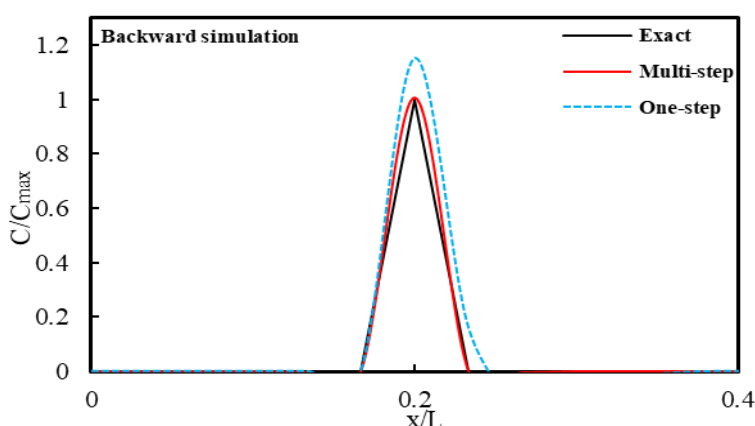
شکل ۵. مقایسه روش چندمرحله‌ای و تک‌مرحله‌ای با حل دقیق

همان‌طور که از شکل ۵ پیداست روش تکمرحله‌ای در شبیه‌سازی دامنه غلظت کمی دچار مشکل شده است و ساخت قله نیز با خطا همراه بوده و قله شبیه‌سازی شده توسط مدل تکمرحله‌ای بالاتر از مقدار واقعی ایجاد شده است. با این حال مکان قله توسط این روش به درستی شناسایی شده است و با توجه به صرفه‌جویی در زمان، نتیجه این روش قابل قبول است. در روش چندمرحله‌ای دقت شبیه‌سازی بسیار بالا بوده است. قله و دامنه غلظت با دقت بسیار زیادی شبیه‌سازی شده است و نتایج عملکرد بسیار بالای روش چندمرحله‌ای را نشان می‌دهد.

آزمون حالت دوم: بررسی کاربرد روش تکمرحله‌ای و چندمرحله‌ای معکوس با استفاده از طرح حافظ گروه در رودخانه
این آزمون حالت با هدف بازسازی شرط اولیه ورودی رودخانه (شکل ۴ ب) توسط مدل معکوس ارائه شده است. شرایط مرزی ورودی $C(0,t) = 0$ و شرایط مرزی در انتها $\left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=L} = 0$ در نظر گرفته شده است. مشابه آزمون حالت اول این بازسازی به دو صورت تکمرحله‌ای و چندمرحله‌ای صورت گرفته است و زمان شبیه‌سازی نیز ۱۲ ساعت در نظر گرفته شده است. نتایج در شکل ۶ و نتایج شاخص‌های آماری در جدول (۳) ارائه شده است.

جدول ۳. نتایج شاخص‌های آماری آزمون حالت دوم

مقدار		شاخص آماری
روش تکمرحله‌ای	روش چندمرحله‌ای	
۰/۲۷	۰/۰۷	MAE(kg/m ³)
۹۷/۱۴	۹۸/۹۲	R ² (%)
۰/۱۱	۰/۰۳	RMSE(kg/m ³)
۵/۲۳	۰/۴۹	MRE(%)



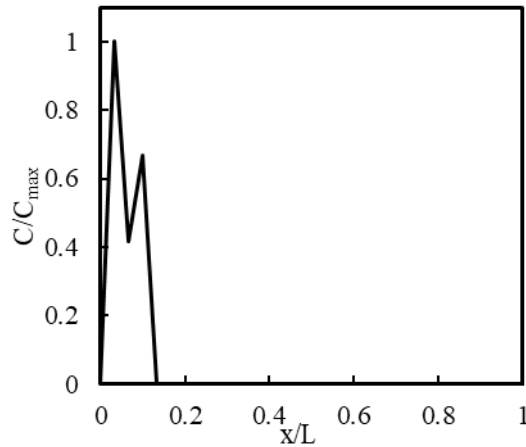
شکل ۶. مقایسه روش چندمرحله‌ای و تکمرحله‌ای به صورت معکوس در زمان با جواب دقیق

با توجه به شکل فوق بازسازی غلظت با روش چندمرحله‌ای با دقت بسیار بالایی انجام شده است. مقادیر بسیار کم RMSE، MAE و MRE و همچنین میل کردن مقدار R² به ۱ در جدول ۳ نشان‌دهنده دقت بالای روش چندمرحله‌ای است. استفاده از روش تکمرحله‌ای با کاهش دقت مدل همراه بوده است. افزایش قابل ملاحظه MAE، RMSE و MRE و کاهش R²، کاهش تطابق نتیجه واقعی و شبیه‌سازی روش تکمرحله‌ای نسبت به روش چندمرحله‌ای را نشان می‌دهد. همان‌طور که از شکل ۶ نیز پیداست روش تکمرحله‌ای نیز در مقایسه با روش چندمرحله‌ای در بازسازی دامنه غلظت و قله آلودگی نسبتاً عملکرد خوبی داشته است و نسبت به روش چندمرحله‌ای کمی دچار مشکل شده است که می‌توان از این خطا صرف‌نظر کرد و این نتیجه با توجه به تکمرحله‌ای بودن شبیه‌سازی یک امر طبیعی است.

آزمون حالت سوم: بررسی کاربرد روش تکمرحله‌ای و چندمرحله‌ای معکوس با استفاده از طرح حافظ گروه در رودخانه با الگو ورودی پیچیده

جهت بررسی توانایی روش تکمرحله‌ای از الگو ورودی پیچیده‌تری نسبت به حالت قبل استفاده شده است. الگو آلاینده در زمان اول مطابق شکل ۷ است و هدف بازسازی این الگو توسط مدل معکوس است. بازسازی این الگو به دو صورت تکمرحله‌ای و چندمرحله‌ای

انجام گرفته است و زمان شبیه‌سازی نیز همچون آزمون حالت‌های قبل ۱۲ ساعت در نظر گرفته شده است.



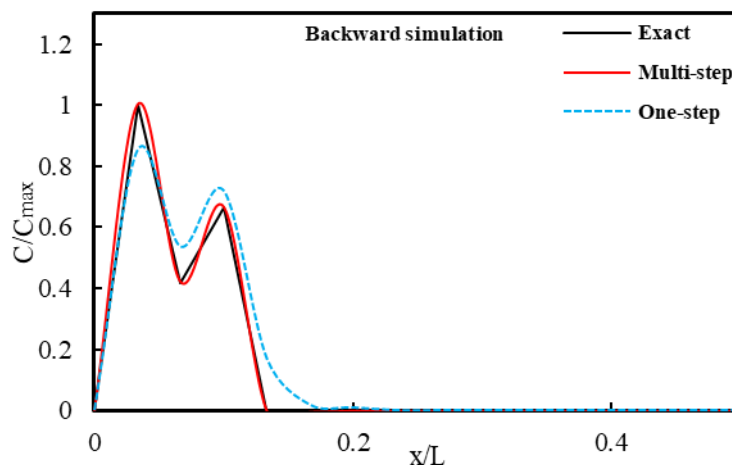
شکل ۷. منحنی سری مکانی غلظت آلاینده در زمان اولیه

عملکرد مدل معکوس تک‌مرحله‌ای و چندمرحله‌ای در بازسازی الگو فوق مورد ارزیابی قرار گرفته است. در این آزمون حالت نیز

شرایط مرزی ورودی مدل معکوس $C(0,t) = 0$ و شرایط مرزی در انتها $\left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=L} = 0$ در نظر گرفته شده است. نتایج شبیه‌سازی معکوس در شکل ۶ و نتایج شاخص آماری در جدول (۴) ارائه شده است.

جدول ۴. نتایج شاخص‌های آماری آزمون حالت سوم

مقدار		شاخص آماری
روش تک‌مرحله‌ای	روش چندمرحله‌ای	
۰/۵۷	۰/۰۶	MAE(kg/m ³)
۹۴/۶۷	۹۹/۱۸	R ² (%)
۰/۲۷	۰/۰۳	RMSE(kg/m ³)
۹/۲۱	۰/۳۶	MRE(%)



شکل ۶. مقایسه روش چندمرحله‌ای و تک‌مرحله‌ای به صورت معکوس در زمان با جواب دقیق

همان‌طور که از شکل فوق پیداست روش تک‌مرحله‌ای در بازسازی قله‌ها بسیار خوب عمل کرده است و حتی قله بلندتر را به درستی

تشخیص داده است. تأخیر زمانی در رسیدن به غلظت اوج در روش تک‌مرحله‌ای نسبت به روش چندمرحله‌ای دیده می‌شود که همین عامل

باعث کاهش دقت این روش نسبت به روش چندمرحله‌ای در بازسازی قله‌ها شده است. دقت بازسازی الگوی برگشتی توسط مدل معکوس نسبت به جواب دقیق از ۸۶٪ تا ۹۹/۸٪ متغیر بوده است که بیشترین خطای روش تکمرحله‌ای در هنگام تشکیل قله بوده است. تأخیر زمانی در رسیدن به غلظت اوج در روش تکمرحله‌ای در آزمون حالت ۳ نسبت به آزمون حالت ۲ مشهودتر است که پیچیدگی شرط انتهایی به‌عنوان ورودی مدل معکوس در این تأخیر زمانی بی‌تأثیر نیست. روش تکمرحله‌ای کمی در تشخیص دامنه دچار مشکل شده است و نسبت به آزمون حالت ۲ دامنه غلظت را با خطای بیشتری شبیه‌سازی کرده است. همان‌طور که از مقایسه جدول ۴ و جدول ۳ مشخص است خطای روش تکمرحله‌ای در آزمون حالت سوم کمی افزایش یافته است که می‌توان نتیجه گرفت که روش تکمرحله‌ای در بازسازی الگوهای پیچیده‌تر با مشکل بیشتری همراه است. با این‌وجود کاهش دقت اندک در تخمین دامنه غلظت، روش تکمرحله‌ای توانایی قابل قبولی در شناسایی سریع قله‌های آلودگی حتی برای الگوهای ورودی پیچیده دارد و در کمترین زمان ممکن پروفیل غلظت در زمان ابتدایی را شبیه‌سازی می‌کند. با توجه به موارد ذکرشده نتایج قابل قبولی در این شبیه‌سازی معکوس حاصل شده است. تشخیص قله‌ها در شبیه‌سازی معکوس از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است و با توجه به پیچیدگی این آزمون حالت، روش تکمرحله‌ای به‌خوبی این بازسازی را انجام داده است.

در روش چندمرحله‌ای مدل باز هم عملکرد بسیار ایده آلی داشته است. قله‌ها و دامنه غلظت با دقت بسیار بالایی شبیه‌سازی شده‌اند و همان‌طور که مقایسه جدول ۴ و جدول ۳ مشخص است خطای روش چندمرحله‌ای در آزمون حالت سوم کمی کاهش نیز داشته است. هرچند که این تغییر خطا آن‌چنان محسوس نیست.

نتیجه‌گیری

در این مقاله، به حل عددی معادله انتقال آلودگی در رودخانه با ضرایب متغیر با استفاده از طرح حافظ گروه پرداخته شد. از آنجاکه بازسازی تابع شدت آلاینده در حداقل زمان ممکن بسیار حائز اهمیت است، حل این معادله با استفاده از یک گام زمانی به‌صورت مستقیم و معکوس در زمان مورد بررسی قرار گرفت. حل تکمرحله‌ای منجر به صرفه‌جویی چشمگیری در هزینه و زمان شبیه‌سازی می‌شود که همین امر باعث تشخیص سریع‌تر زمان و مکان تابع شدت آلاینده نسبت به حل چندمرحله‌ای می‌شود. همان‌طور که بر اساس بررسی مطالعات انجام شده پیرامون کاهش گام زمانی در حل‌های عددی انتظار می‌رفت، نتایج شبیه‌سازی حل تکمرحله‌ای در مقایسه با حل چندمرحله‌ای، کاهش دقت نتایج شبیه‌سازی را نشان داد. همچنین تأخیر در رسیدن به غلظت اوج در شبیه‌سازی معکوس مشاهده شد که در الگوی پیچیده‌تر این تأخیر محسوس‌تر بود اما با وجود صرفه‌جویی در زمان و هزینه در شرایط خاص می‌توان از این کاهش دقت مدل چشم‌پوشی کرد و می‌توان از این روش به‌عنوان یک رویکرد مؤثر و کارآمد در حل‌های عددی نام برد. علاوه بر این موضوع روش تکمرحله‌ای معایب دیگری از جمله عدم نمایش پروفیل مکانی در گام‌های زمانی مختلف و عدم توانایی اجرای مدل در شرایط جریان غیرماندگار دارد. با این حال از مزایای دیگر این روش می‌توان به عدم نیاز به انتخاب و بهینه‌سازی ترم پایداری، حل معادله با ضرایب متغیر و حل معادلات بسیار پیچیده اشاره کرد. این مقاله نشان می‌دهد که روش تکمرحله‌ای طرح حافظ گروه با ویژگی‌ها و مزایای خاص خود، می‌تواند بهبود قابل توجهی در حل عددی معادلات انتقال آلودگی داشته باشد و در توسعه روش‌های حل عددی برای مسائل مشابه مؤثر باشد.

"هیچ‌گونه تعارض منافع بین نویسندگان وجود ندارد"

منابع

- لوشابی، محمد، مظاهری، مهدی و محمدولی سامانی، جمال. (۱۳۹۸). حل معکوس معادله جابه‌جایی - پراکندگی در رودخانه‌ها جهت شناسایی منبع آلاینده. *مجله‌ی مهندسی مکانیک شریف*. ۳(۱۱۳): ۱۰۳-۱۱۳.
- پرمنون، عرفان و مظاهری، مهدی. (۱۳۹۹). شناسایی منبع آلاینده با حل تحلیلی معادله انتقال آلودگی به صورت معکوس در زمان. *هیدروفیزیک*، ۶(۲): ۲۵-۳۹.
- سعادت، امیرمحمد، مظاهری، مهدی و محمدولی سامانی، جمال. (۱۴۰۱). حل معکوس (در زمان) معادله انتقال آلودگی در رودخانه با استفاده از طرح حافظ گروه. *مهندسی عمران فردوسی*، ۴(۳۴): ۵۲-۳۵.
- فردادی شیل‌سر، محمدجواد، مظاهری، مهدی و محمدولی سامانی، جمال. (۱۴۰۰). حل تحلیلی معادله انتقال آلودگی با ضرایب متغیر در رودخانه با استفاده از تبدیل لاپلاس. *مدیریت آب و آبیاری*، ۱۱(۴): ۶۸۳-۶۹۸.



فردادی شیل‌سر، محمدجواد، مظاهری، مهدی و محمدولی سامانی، جمال. (۱۴۰۱). حل تحلیلی معادله انتقال آلاینده در انواع شبکه رودخانه با لحاظ عبارت منبع گسترده. *تحقیقات آب و خاک ایران*، ۵۳(۵): ۱۰۵۷-۱۰۷۷.

خدامباشی امامی، سجاد و مظاهری، مهدی. (۱۴۰۱). آنالیز حساسیت پارامترهای نگهداشت در مدل‌سازی ریاضی انتقال آلودگی در رودخانه‌های دارای نواحی نگهداشت. *علوم و مهندسی آبیاری*، ۴۵(۴): ۱۰۱-۱۱۶.

REFERENCES

- (Kumar), M. G., & Mohamed, S. (2005). Hybrid Genetic Algorithm—Local Search Methods for Solving Groundwater Source Identification Inverse Problems. *Journal of Water Resources Planning and Management*, 131(1), 45–57.
- Ali, I. (2021). Bernstein collocation method for neutral type functional differential equation. *Mathematical Biosciences and Engineering : MBE*, 18(3), 2764–2774.
- Alulema-Pullupaxi, P., Espinoza-Montero, P. J., Sigcha-Pallo, C., Vargas, R., Fernández, L., Peralta-Hernández, J. M., & Paz, J. L. (2021). Fundamentals and applications of photoelectrocatalysis as an efficient process to remove pollutants from water: A review. *Chemosphere*, 281, 130821.
- Ames, K. A., & Epperson, J. F. (1997). A Kernel-Based Method for the Approximate Solution of Backward Parabolic Problems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 34(4), 1357–1390.
- Atmadja, J., & Bagtzoglou, A. C. (2001). State of the art report on mathematical methods for groundwater pollution source identification. *Environmental Forensics*, 2(3), 205–214.
- Burman, E., & Fernández, M. A. (2009). Stabilization of explicit coupling in fluid–structure interaction involving fluid incompressibility. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198(5–8), 766–784.
- Chang, C.-W. (2010). A Backward Group Preserving Scheme for Multi-Dimensional Backward Heat Conduction Problems. *CMES - Computer Modeling in Engineering and Sciences*, 59, 239–274.
- Chang, C.-Y., Dong, M.-G., Deng, Y.-R., Xiao, R.-B., & Liu, L.-L. (2019). [Thoughts on and Construction of a Risk Management and Control System for Contaminated Sites in the Guangdong-Hong Kong-Macao Greater Bay Area]. *Huan jing ke xue= Huanjing kexue*, 40(12), 5570–5580.
- Chang, C., Liu, C., & Chang, J. (2009). A new shooting method for quasi-boundary regularization of multi-dimensional backward heat conduction problems. *Journal of the Chinese Institute of Engineers*, 32(3), 307–318.
- Chang, C. W., & Kuo, C. C. (2014). A Lie-group approach for solving backward two-dimensional nonlinear Klein-Gordon equation. *Procedia Engineering*, 79(1st ICM), 590–598.
- Chang, C. W., & Liu, C. S. (2014). The backward group preserving scheme for multi-dimensional nonhomogeneous and nonlinear backward wave problems. *Applied Mathematical Modelling*, 38(15–16), 4027–4048.
- Chapra, S. C. (2008). *Surface Water-quality Modeling*. Waveland Press.
- Chartres, B., & Stepleman, R. (1972). A general theory of convergence for numerical methods. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 9(3), 476–492.
- Chen, Y. (2016). International Journal of Heat and Mass Transfer High order implicit and explicit Lie-group schemes for solving backward heat conduction problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 101, 1016–1029.
- Cheng, W. P., & Jia, Y. (2010). Identification of contaminant point source in surface waters based on backward location probability density function method. *Advances in Water Resources*, 33(4), 397–410.
- Conrad, P. R., Girolami, M., Särkkä, S., Stuart, A., & Zygalakis, K. (2017). Statistical analysis of differential equations: introducing probability measures on numerical solutions. *Statistics and Computing*, 27(4), 1065–1082.
- Crooks, J., & Isakov, V. (2013). A wavelet-based approach to blending observations with deterministic computer models to resolve the intraurban air pollution field. *Journal of the Air & Waste Management Association (1995)*, 63(12), 1369–1385.
- Cupola, F., Tanda, M. G., & Zanini, A. (2015). Laboratory sandbox validation of pollutant source location methods. *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*, 29(1), 169–182.
- El Badia, A., Ha-Duong, T., & Hamdi, A. (2005). Identification of a point source in a linear advection-dispersion-reaction equation: Application to a pollution source problem. *Inverse Problems*.
- Faraji, M., & Mazaheri, M. (2022). Mathematical model of solute transport in rivers with storage zones using nonlinear dispersion flux approach. *Hydrological Sciences Journal*, 67(11), 1656–1668.
- Fardadi Shilsar, M. J., Mazaheri, M., & Mohammad Vali Samani, J. (2022). Analytical solution of the pollution

- transport equation with variable coefficients in river using the Laplace Transform. *Water and Irrigation Management*, 11(4), 683–698 (inPersian).
- Fardadi Shilsar, M. J., Mazaheri, M., & Mohammad Vali Samani, J. (2023). A semi-analytical solution for one-dimensional pollutant transport equation in different types of river networks. *Journal of Hydrology*, 619(February), 129287.
- Fardadi Shilsar, M. J., Mazaheri, M., & Mohammad Vali Samani mal, J. (2022). Analytical solution of pollutant transport equation in different types of river networks considering distributed source term. *Iranian Journal of Soil and Water Research*, 53(5), 1057–1077 (inPersian).
- Fischer, H. B., List, J. E., Koh, C. R., Imberger, J., & Brooks, N. H. (1979). *Mixing in inland and coastal waters*. Academic press.
- Fürst, J. J., Rybak, O., Goelzer, H., De Smedt, B., De Groen, P., & Huybrechts, P. (2011). Improved convergence and stability properties in a three-dimensional higher-order ice sheet model. *Geoscientific Model Development*, 4(4), 1133–1149.
- Gao, W., Partohaghighi, M., Baskonus, H. M., & Ghavi, S. (2019). Regarding the group preserving scheme and method of line to the numerical simulations of Klein–Gordon model. *Results in Physics*, 15, 102555.
- Ghane, A., Mazaheri, M., & Mohammad Vali Samani, J. (2016). Location and release time identification of pollution point source in river networks based on the Backward Probability Method. *Journal of Environmental Management*, 180, 164–171.
- Glenis, V., McGough, A. S., Kutija, V., Kilsby, C., & Woodman, S. (2013). Flood modelling for cities using Cloud computing. *Journal of Cloud Computing: Advances, Systems and Applications*, 2(1), 7.
- Gnudi, G. (2023). Analytical solution to Windkessel models using piecewise linear aortic flow waveform. *Physiological Measurement*, 44(6).
- Godwin, B. L., Albeke, S. E., Bergman, H. L., Walters, A., & Ben-David, M. (2015). Density of river otters (*Lontra canadensis*) in relation to energy development in the Green River Basin, Wyoming. *The Science of the Total Environment*, 532, 780–790.
- Guo, G., & Cheng, G. (2019). Mathematical modelling and application for simulation of water pollution accidents. *Process Safety and Environmental Protection*, 127, 189–196.
- Harvey, R., & Versegny, D. L. (2016). The reliability of single precision computations in the simulation of deep soil heat diffusion in a land surface model. *Climate Dynamics*, 46, 3865–3882.
- Ibiş, B., & Bayram, M. (2014). Approximate solution of time-fractional advection-dispersion equation via fractional variational iteration method. *TheScientificWorldJournal*, 2014, 769713.
- Jiang, D., Zhu, H., Wang, P., Liu, J., Zhang, F., & Chen, Y. (2021). Inverse identification of pollution source release information for surface river chemical spills using a hybrid optimization model. *Journal of Environmental Management*, 294, 113022.
- Johnson, T. C., Baines, M. J., & Sweby, P. K. (2002). A box scheme for transcritical flow. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 55(8), 895–912.
- Karami Cheme, E., & Mazaheri, M. (2021). The effect of neglecting spatial variations of the parameters in pollutant transport modeling in rivers. *Environmental Fluid Mechanics*, 21(3), 587–603.
- Kato, S., Zhang, C., & Kano, M. (2023). Simple algorithm for judging equivalence of differential-algebraic equation systems. *Scientific Reports*, 13(1), 11534.
- Khodambashi Emami, S., & Mazaheri, M. (2023). Sensitivity Analysis of Transient Storage Parameters in Mathematical Modeling of Pollution Transport in Rivers Containing Storage Zone. *Irrigation Sciences and Engineering*, 45(4), 101–116 (inPersian).
- Lee, Y. J., Park, C., & Lee, M. L. (2018). Identification of a contaminant source location in a river system using random forest models. *Water*, 10(4), 391.
- Liu, C.-S. (2006). A Group Preserving Scheme for Burgers Equation with Very Large Reynolds Number. *Computer Modeling in Engineering & Sciences*, 12(3), 197–212.
- Liu, C.-S., & Chang, C.-W. (2012). A novel mixed group preserving scheme for the inverse Cauchy problem of elliptic equations in annular domains. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 36(2), 211–219.
- Liu, C. S. (2001). Cone of non-linear dynamical system and group preserving schemes. *International Journal of Non-Linear Mechanics*, 36(7), 1047–1068.
- Liu, C. S. (2004). Group preserving scheme for backward heat conduction problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47(12–13), 2567–2576.
- Liu, C. S. (2006). An efficient backward group preserving scheme for the backward in time Burgers equation. *CMES - Computer Modeling in Engineering and Sciences*, 12(1), 55–65.
- Liu, C. S., Chang, C. W., & Chang, J. R. (2006). Past cone dynamics and backward group preserving schemes



- for backward heat conduction problems. *CMES - Computer Modeling in Engineering and Sciences*, 12(1), 67–81.
- Liu, C. S., Chang, C. W., & Chang, J. R. (2010). The backward group preserving scheme for 1D backward in time advection-dispersion equation. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 26(1), 61–80.
- Loushabi, M., Mazaheri, M., & Mohammad Vali Samani, J. (2019). INVERSE SOLUTION OF THE ADVECTION-DISPERSION EQUATION IN RIVERS FOR POLLUTION SOURCE IDENTIFICATION. *Sharif Journal of Mechanical Engineering*, 35.3(1), 103–113 (inPersian).
- Lu, H., & Yu, S. (2019). Pollutant source analysis and tempo-spatial analysis of pollutant discharge intensity in a transboundary river basin. *Environmental Science and Pollution Research International*, 26(2), 1336–1354.
- Ma, L. (2022). Exact Solutions of Three Types of Conformable Fractional-Order Partial Differential Equations. *Computational Intelligence and Neuroscience*, 2022, 5295115.
- Manson, J. R., Wallis, S. G., & Wang, D. (2000). A conservative, semi-Lagrangian fate and transport model for fluvial systems—II. numerical testing and practical applications. *Water Research*, 34(15), 3778–3785.
- Mazaheri, M., Mohammad Vali Samani, J., & Samani, H. M. V. (2015). Mathematical Model for Pollution Source Identification in Rivers. *Environmental Forensics*.
- Mohan, S. R., & Bithin, D. (2006). Identification of Groundwater Pollution Sources Using GA-based Linked Simulation Optimization Model. *Journal of Hydrologic Engineering*, 11(2), 101–109.
- Nardo, A. Di, Tuccinardi, F. P., Srl, P., Di Nardo, A., Santonastaso, G. F., Battaglia, R., Musmarra, D., Castaldo, F., Della Ventura, B., Iervolino, M., & Velotta, R. (2015). Smart identification system of surface water contamination by an innovative biosensor network VALUEMAG Project on BBI-2016-R09 View project Water Management View project Smart identification system of surface water contamination by an innovative biosensor. *Conference: CEMEPE - 5th International Conference on Environmental Management, Engineering, Planning and Economics*.
- Nave, Op., Shemesh, U., & HarTuv, I. (2021). Applying Laplace Adomian decomposition method (LADM) for solving a model of Covid-19. *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, 24(14), 1618–1628.
- Neupauer, R. M., Borchers, B., & Wilson, J. L. (2000). Comparison of inverse methods for reconstructing the release history of a groundwater contamination source. *Water Resources Research*, 36(9), 2469–2475.
- Neupauer, R. M., & Wilson, J. L. (2005). Backward probability model using multiple observations of contamination to identify groundwater contamination sources at the Massachusetts Military Reservation. *Water Resources Research*, 41(2), 1–14.
- Nichols, R. H., & Heikkinen, B. D. (2006). Validation of implicit algorithms for unsteady flows including moving and deforming grids. *Journal of Aircraft*, 43(5), 1341–1351.
- Nikinmaa, M. (2014). *Chapter 4 - Sources and Transport of Chemicals in Aquatic Systems* (M. B. T.-A. I. to A. T. Nikinmaa (ed.); pp. 47–52). Academic Press.
- Nobile, R., Vahdati, M., Barlow, J. F., & Mewburn-Crook, A. (2014). Unsteady flow simulation of a vertical axis augmented wind turbine: A two-dimensional study. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 125, 168–179.
- Ojo, S. O., Trinh, L. C., Khalid, H. M., & Weaver, P. M. (2021). Inverse differential quadrature method: mathematical formulation and error analysis. *Proceedings. Mathematical, Physical, and Engineering Sciences*, 477(2248), 20200815.
- Paladino, O., Moranda, A., Massabò, M., & Robbins, G. A. (2018). Analytical Solutions of Three-Dimensional Contaminant Transport Models with Exponential Source Decay. *Ground Water*, 56(1), 96–108.
- Parker, J. C., & Kim, U. (2015). An upscaled approach for transport in media with extended tailing due to back-diffusion using analytical and numerical solutions of the advection dispersion equation. *Journal of Contaminant Hydrology*, 182, 157–172.
- Permanoon, E., & Mazaheri, M. (2021). Identify the source of pollution with an Inverse-time analytical solution to the pollution transport equation. *Hydrophysics*, 6(2), 25–39 (inPersian).
- Pregla, R., & Pascher, W. (1989). The method of lines. *Numerical Techniques for Microwave and Millimeter Wave Passive Structures*, 1, 381–446.
- Rockne, R. C., Hawkins-Daarud, A., Swanson, K. R., Sluka, J. P., Glazier, J. A., Macklin, P., Hormuth, D. A., Jarrett, A. M., Lima, E. A. B. F., Tinsley Oden, J., Biros, G., Yankeelov, T. E., Curtius, K., Al Bakir, I., Wodarz, D., Komarova, N., Aparicio, L., Bordyuh, M., Rabadan, R., ... Scott, J. G. (2019). The 2019 mathematical oncology roadmap. *Physical Biology*, 16(4), 41005.

- Rodman, C. H., & Martin, A. E. (2020). Quantification of spatiotemporal parameter behavior during walking speed transitions. *Journal of Biomechanics*, *112*, 110068.
- Roohollah, N., Zhiqiang, D., Amin, K., & Torabi, K. F. (2016). How Reliable Are ANN, ANFIS, and SVM Techniques for Predicting Longitudinal Dispersion Coefficient in Natural Rivers? *Journal of Hydraulic Engineering*, *142*(1), 4015039.
- Saadat, a. mohammad, Mazaheri, M., & MV Samani, J. (2022). Backward Solution (in-time) of the Pollution Transport Equation in River Using Group Preserving Scheme. *Ferdowsi Civil Engineering (inPersian)*.
- Santos, L., Thirel, G., & Perrin, C. (2018). Continuous state-space representation of a bucket-type rainfall-runoff model: a case study with the GR4 model using state-space GR4 (version 1.0). *Geoscientific Model Development*, *11*(4), 1591–1605.
- Seifi, A., & Riahi-Madvar, H. (2019). Improving one-dimensional pollution dispersion modeling in rivers using ANFIS and ANN-based GA optimized models. *Environmental Science and Pollution Research International*, *26*(1), 867–885.
- Singh, R. K., Paul, T., Mahato, N. K., & Singh, M. K. (2023). Contaminant dispersion with axial input sources in soil media under non-linear sorption. *Environmental Technology*, *44*(13), 1903–1915.
- Skaggs, T. H., & Kabala, Z. J. (1995). Recovering the History of a Groundwater Contaminant Plume: Method of Quasi-Reversibility. *Water Resources Research*.
- Toprak, Z. F., Sen, Z., & Savci, M. E. (2004). Comment on “Longitudinal dispersion coefficients in natural channels”. *Water Research*, *38*(13), 3139–3143.
- Tressler, A., & Uchrin, C. (2014). Mathematical simulation of chlorinated ethene concentration rebound after in situ chemical oxidation. *Journal of Environmental Science and Health. Part A, Toxic/Hazardous Substances & Environmental Engineering*, *49*(8), 869–881.
- Tsuzuki, Y. (2015). Relationships between pollutant discharge and water quality in the rivers from “better” to “worse” water quality. *Ecological Indicators*, *52*, 256–269.
- Vitanov, N. K. (2022). Simple Equations Method (SEsM): An Effective Algorithm for Obtaining Exact Solutions of Nonlinear Differential Equations. *Entropy (Basel, Switzerland)*, *24*(11).
- Wang, H., Cosnefroy, M., & Hornikx, M. (2021). An arbitrary high-order discontinuous Galerkin method with local time-stepping for linear acoustic wave propagation. *The Journal of the Acoustical Society of America*, *149*(1), 569.
- Wang, J., Zhao, J., Lei, X., & Wang, H. (2018). New approach for point pollution source identification in rivers based on the backward probability method. *Environmental Pollution (Barking, Essex : 1987)*, *241*, 759–774.
- Wang, W., Ji, C., Li, C., Wu, W., & Gisen, J. I. A. (2023). Source identification in river pollution incidents using a cellular automata model and Bayesian Markov chain Monte Carlo method. *Environmental Science and Pollution Research*, 1–14.
- Woolway, M., Jacobs, B. A., Momoniat, E., Harley, C., & Britz, D. (2020). Numerical Convergence Analysis of the Frank-Kamenetskii Equation. *Entropy (Basel, Switzerland)*, *22*(1).
- Wu, Y., Wang, F., Wang, Q., Li, Y., & Jiang, S. (2019). A high temporal resolution numerical algorithm for shock wave velocity diagnosis. *Scientific Reports*, *9*(1), 8597.
- Xing, Y., Ji, Y., & Zhang, H. (2019). On the construction of a type of composite time integration methods. *Computers & Structures*, *221*, 157–178.
- Yuan, X.-C., Wang, M., Guo, X.-Y., & Wu, D.-L. (2022). [Analysis of the Seasonal Changes in Planktonic Microbial Diversity in Urban River Supplied with Reclaimed Water: A Case Study of the North Canal River]. *Huan jing ke xue= Huanjing kexue*, *43*(8), 4097–4107.
- Zarif Sanayei, H. R., Javdanian, H., & Rakhshandehroo, G. R. (2021). Assessment of confined aquifer response to recharge variations and water inflow distributions using analytical approach. *Environmental Science and Pollution Research International*, *28*(36), 50878–50889.
- Zhang, S., & Xin, X. (2017). Pollutant source identification model for water pollution incidents in small straight rivers based on genetic algorithm. *Applied Water Science*, *7*(4), 1955–1963.
- Zhang, T., Li, H., & Wang, S. (2011). Identification of particulate contaminant source locations in enclosed spaces with inverse CFD modelling. *12th International Conference on Indoor Air Quality and Climate 2011*.
- Zhou, J. G., Haygarth, P. M., Withers, P. J. A., Macleod, C. J. A., Falloon, P. D., Beven, K. J., Ockenden, M. C., Forber, K. J., Hollaway, M. J., Evans, R., Collins, A. L., Hiscock, K. M., Wearing, C., Kahana, R., & Villamizar Velez, M. L. (2016). Lattice Boltzmann method for the fractional advection-diffusion equation. *Physical Review. E*, *93*, 43310.



Using one-step group preserving schemes for contaminant transport modeling in rivers

EXTENDED ABSTRACT

Introduction:

Recent years have witnessed growing environmental worries, rendering the creation of computer models that foresee pollutant dispersal in natural aquatic systems an absolute prerequisite. As expeditious simulation of the pollutant intensity function is of the essence, determining a technique to accomplish this with alacrity is imperative.

Material and method:

The current study implements the Group Preserving Scheme (GPS), predicated on Lie groups, to resolve the pollution transport equation in rivers, both directly and inversely. Initially, GPS is elucidated for the one-step direct solution of the pollution transport equation. Subsequently, the explication of the one-step Backward Group Preserving Scheme for the one-step inverse solution of this equation is examined. Finally, the advection-dispersion equation is resolved directly and inversely utilizing this methodology in a one-step and multi-step manner, with the accuracy of these two solutions evaluated against the exact solution. In this research, as an initial phase, the direct numerical approach is employed to solve the pollution transport equation unidimensionally. The resultant outcomes are then utilized as inputs for the second phase of computations (inverse solution of the pollution transport equation) to derive the final results (pollutant intensity function). To model the transport and release of pollutants in the river using GPS, the river is divided into n intervals.

Result and Discussion:

Three test cases have been designed to evaluate the one-step solution of the pollution transport equation directly and inversely in the temporal dimension utilizing the GPS. These three modal tests are presented in sequence to demonstrate the performance of the one-step method and its comparison to the multi-step approach. Since the pollution transport equation is solved with variable coefficients herein, the flow parameters must be computed first, obtained by solving the flow equations and employing extant models. The river characteristics have been considered per the actual conditions test, and the flow parameters have been calculated using the Saint Venant equation. For superior evaluation of the one-step method, statistical error indices, including Correlation Coefficient (R²), Root Mean Square Error (RMSE), Mean Absolute Error (MAE), and Mean Relative Error (MRE) have been utilized. In the first test case, where the simulation was performed directly, the one-step method encountered minor issues in simulating the concentration range, and the construction of the peak was also accompanied by an error, with the peak simulated by the one-step model created higher than the actual value. In the second test case involving reverse simulation, the one-step method performed relatively well compared to the multi-step method in reconstructing the concentration range and pollution peak, with minimal problems compared to the multi-step method, rendering this error negligible and the outcome expected given the one-step simulation. In the third test case intended for reverse simulation of the complex pattern, the one-step method performed remarkably well in reconstructing the peaks and correctly identified even the highest peak. The time delay in reaching peak concentration is evident in the one-step method compared to the multi-step method, engendering decreased accuracy of this method relative to the multi-step method in peak reconstruction. The accuracy of reconstructing the returned pattern by the inverse model versus the exact solution ranged from 86% to 99.8%, representing the maximum error of the one-step method during peak formation. The time delay in attaining peak concentration in the one-step method is more conspicuous in the mode 3 test than in the mode 2 test, with the complexity of the final condition as input to the inverse model not impervious to this time delay.

Conclusion:

The location of the peak is accurately identified by this method, and considering the time savings, the outcome of this method is acceptable. The delay in attaining peak concentration was observed in the reverse simulation, being more conspicuous in the more complex model. However, despite expedited and economical completion under certain conditions, a decrease in model accuracy can be overlooked, and numerical solutions utilized from this method as an efficacious and efficient approach delineated.

Keywords: Advection-Dispersion-Equation, Identification of Contaminant Sources, Inverse Method, Numerical Method, One-Step Group Preserving Scheme.