


## Backward Solution (In-Time) of the Pollution Transport Equation in River Using Group Preserving Scheme

Research Article

Amir Mohammad Saadat<sup>1</sup>, Mehdi Mazaheri<sup>2</sup> , Jamal Mohammad Vali Samani<sup>3</sup>

DOI: 10.22067/jfcej.2022.77645.1165

### 1. Introduction

The inverse method is an effective method for detecting the intensity and source of pollutants. The identification of contaminant sources has become increasingly important in recent decades due to the importance of protecting water resources. This study aimed to reconstruct the concentration function of contaminants. Using the inverse solution method, problems are solved in reverse time steps and a general equation is obtained that can solve ordinary differential equations. The return response of this equation prevents the data from diverging. Three examples are presented in this study to demonstrate the accuracy of forward and backward group preserving schemes. No study has been conducted so far regarding the method for identifying the intensity function of a contaminant source in surface water by using a backward group preserving scheme (BGPS). Based on the research done to date, the inverse solution of the pollutant transport equation in a river with variable coefficients has been considered. Our research involves solving the advection-dispersion equation in one dimension and identifying the intensity function of the contaminant source in the river using a group-preserving scheme.

### 2. Materials and methods

This study addresses the direct and inverse problems of the transport equation in the river through the use of the group preserving scheme (GPS), which is based on the Lee group. Through this method, the advection-dispersion equation was solved directly and inversely. By knowing the initial condition or boundary condition downstream, the direct procedure can be calculated. The inverse model works backward from the terminal condition, calculating the river's concentration in the initial stage. Due to the lack of actual data, in this study, the direct solution of the pollution transport equation is used to obtain the terminal

condition. The one-dimensional advection-dispersion equation is as follows:

$$\frac{\partial(AC)}{\partial t} = -\frac{\partial(QC)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}(AD \frac{\partial C}{\partial x}) - AkC + AS \quad (1)$$

where  $C$  is the pollutant concentration,  $A$  is the flow sectional area,  $Q$  is the discharge,  $D$  is the longitudinal dispersion coefficient,  $t$  is the time,  $x$  is the longitudinal space coordinate,  $k$  is the first order decay coefficient, and  $S$  is the source term.

In Figure 1, a null cone shows the solution domain in Minkowski space. The dynamical system is clearly constrained by its form. It can be said that this figure shows the solution range of river concentrations in Minkowski space.

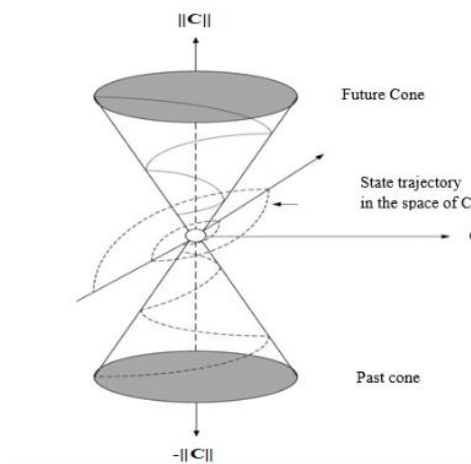


Figure 1. Cone condition and Minkowski space

### 3. Results and discussion

In order to solve the pollution transfer equation directly and inversely, two equations are obtained using the method of lines and GPS.

\*Manuscript received: July 11, 2022, Revised, September 7, 2022, Accepted, November 15, 2022.

<sup>1</sup> MSc Student, Department of Water Engineering and Management, Faculty of Agriculture, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran.

<sup>2</sup> Corresponding author. Associate Professor, Department of Water Engineering and Management, Faculty of Agriculture, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran. **Email:** m.mazaheri@modares.ac.ir

<sup>3</sup> Professor, Department of Water Engineering and Management, Faculty of Agriculture, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran

A forward and backward group preserving scheme was evaluated through three examples. These three examples demonstrate the accuracy of this method. To solve the pollution transfer equation with variable coefficients, the flow parameters must be calculated first. These parameters are obtained by solving the flow equations and using existing models. Based on real-world examples, flow parameters, depth, speed, flow area, and other parameters have been calculated using flow calculation models in different parts of the river. Dispersion coefficients can also be determined in different ways. The empirical formulas were applied in this study.

In the first example, the goal was to evaluate the direct method. In this way, the finite difference method was used to verify the GPS validity after running the model with boundary conditions, demonstrating its high compatibility. A variety of statistical indicators were used to evaluate the model. The very low MAE, RMSE, and MRE values, along with an  $R^2$  value close to 1, indicate high accuracy and the full ratio between this method and fully implicit finite difference methods. Table 1 shows the results.

**Table 1. Statistical indexes of the first example**

index	value
MAE(kg/m <sup>3</sup> )	0.05
R <sup>2</sup> (%)	99.997
RMSE(kg/m <sup>3</sup> )	0.02
MRE(%)	0.23

An investigation of the application of the BGPS using spatial profile is presented in the second example. As part of the solution algorithm, the spatial profile is used as the input to the direct model. Direct model results are used as inputs to inverse models. When reconstructing the pollutant intensity function, the inverse model is evaluated. The input data of the inverse model (spatial profile) were subjected to 5% to 15% of errors completely randomly so that the impacts of these errors can be observed. In this example, the MAE, RMSE, and MRE statistical indices have small values that demonstrate the superior accuracy of inverse methods. The high value of  $R^2$  indicates that the two methods match well, and even these values show acceptable results when errors are included. Despite errors, the pollutant pattern is well reconstructed, and very acceptable results are obtained. Table 2 shows the related results.

**Table 2. Statistical indexes of the second example**

error/ index	error 0%	error 5%	error 10%	error 15%
MAE(kg/m <sup>3</sup> )	0.19	0.38	0.59	0.77
R <sup>2</sup> (%)	99.62	97.01	95.89	94.04
RMSE(kg/m <sup>3</sup> )	0.08	0.17	0.25	0.39
MRE(%)	3.54	6.39	8.75	12.56

As an example of the third model, the inputs to the direct model are time series. The results from the direct model are used as inputs to the inverse model. The purpose of evaluating the inverse model is to reconstruct the pollutant intensity function. A random error of 5 to 15 percent was applied to the input data in this example. The MAE, RMSE, and MRE statistical indicators in this example have small values, demonstrating the high accuracy of the inverse method. The high  $R^2$  value shows good compatibility between the two methods. The increase in MAE, RMSE, and MRE as well as the decrease in  $R^2$  demonstrate that the accuracy of inverse model has decreased due to increase in error applied to the initial condition. Table 3 shows the results.

**Table 3. Statistical indexes of the third example**

error/ index	error 0%	error 5%	error 10%	error 15%
MAE(kg/m <sup>3</sup> )	0.26	0.56	0.73	0.91
R <sup>2</sup> (%)	99.22	95.14	94.81	92.09
RMSE(kg/m <sup>3</sup> )	0.11	0.24	0.31	0.45
MRE(%)	4.6	8.2	10.2	14.3

**4. Conclusion**

These examples demonstrate the high accuracy of the BGPS plan in forming the pollution intensity function and reconstructing the spatial profile. The model is also capable of showing the spatial profile of the concentration at different times. This is very useful for observing the evolution and spatial changes of the concentration distribution over time. Unlike other methods, this method does not have problems such as selecting and optimizing stability terms due to its numerical nature, which increases its speed and reduces errors. Moreover, this method has the advantage that there is no need to prepare data at a small number of intervals along the river. This is considered an extremely valuable benefit due to its complexity. The fast speed and accuracy of this model, as well as the simplicity of calculations, enable it to save time. As a limitation of this method, it is not possible to reconstruct time series data.



## حل معکوس (در زمان) معادله انتقال آلودگی در رودخانه با استفاده از طرح حافظ گروه\*

مقاله پژوهشی

DOI: 10.22067/ijfeci.2022.77645.1165

امیر محمد سعادت<sup>(۱)</sup> مهدی مظاهری<sup>(۲)</sup> جمال محمدولی سامانی<sup>(۳)</sup>

**چکیده** امروزه بسیاری از منابع آب‌های سطحی و زیرزمینی در اثر ورود پساب‌های ناشی از مواد مختلف در معرض آلودگی قرار می‌گیرند. با توجه به اینکه اکثر روش‌ها جهت بازیابی تابع شدت آلودگی برای آب‌های زیرزمینی انجام گرفته است، ارائه روشی جهت بازیابی تابع شدت آلاینده در رودخانه‌ها با شرایط جریان پیچیده‌تر می‌تواند مورد توجه قرار گیرد. در این پژوهش هدف محاسبه تابع شدت منبع آلاینده بوده که بر اساس تحقیقات صورت گرفته تاکنون این مسئله با استفاده از راه‌حل عددی طرح حافظ گروه مورد مطالعه قرار نگرفته است. طرح حافظ گروه روشی دقیق برای حل مسائل بدخیم است که در این نوشتار با استفاده از این روش، معادله یک‌بعدی جابه‌جایی-پراکندگی با ضرایب متغیر حل شده است. اساس روش حل معکوس ارائه شده به این صورت است که با حل سیستم‌های دینامیکی در گام‌های زمان‌های منفی، یک معادله کلی حاصل می‌شود که قادر به حل معادلات دیفرانسیل معمولی خواهد بود. پاسخ‌های برگشتی این معادله را به همگرایی لازم می‌رساند و از واگرا شدن داده‌ها جلوگیری می‌نماید. در این پژوهش سه مثال جهت نشان دادن دقت 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 و به منظور صحت‌سنجی حل مستقیم از حل عددی تمام ضمنی تفاضل محدود استفاده شده است. مقایسه نتایج این دو روش با شاخص‌های آماری، انطباق این دو مدل در روش مستقیم را نشان می‌دهد. در گام بعد با دو مثال مختلف با استفاده از حل طرح معکوس حافظ گروه به شبیه‌سازی تابع شدت آلاینده در بالادست رودخانه پرداخته می‌شود و پس از شبیه‌سازی و صحت‌سنجی مدل معکوس با حل مستقیم، ارزیابی این روش با استفاده از شاخص‌های آماری انجام می‌شود که نتایج دقت خوب این روش را نشان می‌دهد.

**واژه‌های کلیدی** حل عددی، روش معکوس، طرح معکوس حافظ گروه، معادله جابه‌جایی-پراکندگی، روش عددی خطوط.

## Backward Solution (in-time) of the Pollution Transport Equation in River Using Group Preserving Scheme

Amir Mohammad Saadat Mehdi Mazaheri Jamal Mohammad Vali Samani

**Abstract** Today, most of the surface water and groundwater resources are exposed to contamination by different materials sewage. because most of the methods have been used to restore the pollution intensity function for groundwater, representing a method to restore pollution intensity function in rivers with more complex flow conditions is considerable. this research aim is to calculate the intensity function of the contamination source, by the numerical solution of group preserving scheme, which has not been observed in other researches done so far. Group preserving scheme is an accurate method to solve ill-posed problems. By implementing this method the one-dimensional advection-dispersion equation with variable coefficients has been solved. The principle of the introduced backward solution method is that by solving the dynamic systems in negative time steps, a general equation will be obtained, which can solve ordinary differential equations. The responses of this equation will lead to convergence of the equation and prevent the divergence of the data. three examples have been presented to show the accuracy of the forward and backward group preserving scheme, Firstly, using direct solutions of the river, the intensity of pollution concentration in the river is calculated, and the implicit finite difference method is applied to verify the accuracy of the direct solutions. In the direct method, the results of the two models were compared with statistical indexes in order to demonstrate the conformity of the two models. In the next step, by solving the backward group preserving scheme in two different examples, the concentration of pollutants upstream is simulated. Following the simulation and verification of the inverse model by direct solution, statistical indexes are used to evaluate the effectiveness of this method.

**Keywords** Numerical Solution, Reverse Method, Backward Group Preserving Scheme, Advection-dispersion Equation, Numerical Method of Lines.

\* تاریخ دریافت مقاله ۱۴۰۱/۴/۲۰ و تاریخ پذیرش آن ۱۴۰۱/۸/۲۴ می‌باشد.

(۱) دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه مهندسی و مدیریت آب، دانشکده کشاورزی، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران.

(۲) نویسنده مسئول: دانشیار، گروه مهندسی و مدیریت آب، دانشکده کشاورزی، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران.

(۳) استاد، گروه مهندسی و مدیریت آب، دانشکده کشاورزی، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران.

## مقدمه

امروزه آلودگی آب‌های سطحی یکی از بزرگترین معضلات زندگی انسان و از مهم‌ترین مسائل زیست‌محیطی است که برخلاف اهمیت آن در معرض انواع آلودگی‌های شیمیایی و بیولوژیک قرار دارد. باوجود قوانین و مقررات برای جلوگیری از تخلیه غیرمجاز پساب‌های ناشی از صنایع و کشاورزی، بازهم جلوگیری از این اتفاق امکان‌پذیر نیست، ازاین‌رو شناخت مکان و زمان تخلیه آلودگی در کمترین زمان و کمترین هزینه موردتوجه محققان این بخش قرار گرفته است، روش‌های مسئله معکوس (Inverse problem) راه‌حل بسیاری از مشکلات در شناسایی شدت و منبع آلاینده می‌باشد. با توجه به اهمیت حفاظت از منابع آب در دهه‌های اخیر، شناسایی منابع آلاینده موردتوجه بسیاری از پژوهش‌گران قرار گرفته است.

می‌توان گفت مهم‌ترین پارامتر انتقال آلودگی در رودخانه، انتقال آلودگی از یک مکان به مکان دیگر است که توسط جریان آب رخ می‌دهد، این فرایند انتقال جا به جایی (Advection) می‌باشد [1]. از دیگر فرایندها انتقال در رودخانه فرایند پراکندگی (Dispersion) می‌باشد که توسط فیک (Fick) معرفی شده است [1]. در بحث انتقال آلودگی در رودخانه عموماً فرایند جابه‌جایی مطرح است اما فرایند پراکندگی نیز اثرگذار می‌باشد [2]. بر اساس قانون اول فیک، معادله دیفرانسیل حاکم بر انتقال و انتشار آلاینده در رودخانه همان معادله جابه‌جایی-پراکندگی-واکنش (Advection-Dispersion-Reaction) است که از نوع معادلات دیفرانسیل سهموی غیر همگن، خطی و مرتبه دوم می‌باشد و با حل معکوس این معادله در گام‌های زمانی منفی می‌توان توزیع شدت منبع آلاینده را با توجه به معلوم بودن مکان و زمان توزیع غلظت آلودگی محاسبه نمود.

به‌طورکلی حل معکوس معادله انتقال آلودگی در رودخانه‌ها و آب‌های زیرزمینی توسط سه روش کلی شبیه‌سازی-بهینه‌سازی (Simulation optimization method)، احتمالاتی و زمین‌آماری (Geostatistical approach) و ریاضی (Mathematical method) مورد بررسی قرار گرفته است [3].

در روش اول از ترکیب یک الگوریتم بهینه‌سازی با یک روش عددی جهت حل معکوس معادله انتقال آلودگی استفاده می‌شود که به طبع نیاز به کامپیوترهایی با پردازنده قوی می‌باشد که نتیجه آن افزایش هزینه و زمان محاسبات می‌باشد و از مزیت‌های این

روش می‌توان به تناسب این روش با محیط‌هایی با مقیاس بزرگ اشاره کرد. در همین راستا در سال ۲۰۱۵ ناردو و همکاران [4] با استفاده از روش تنظیم حداقل مربعات (Least squares approach) و همچنین استفاده از اطلاعات دریافت شده از حسگرهای زیستی، به شبیه‌سازی زمان و منبع آلاینده در محیط یک‌بعدی پرداختند. در سال ۲۰۱۷ نیز ژانگ و ژین [5] با ترکیب روش‌های الگوریتم ژنتیک پایه و حل تحلیلی معادله انتقال و انتشار تابع شدت زمانی آلاینده را بازسازی کردند. مهیتاکومار و سعید در سال ۲۰۰۵ و داتا و سینگ در سال ۲۰۰۶ [7] با استفاده از این روش به شبیه‌سازی معادله انتقال و انتشار پرداختند [6].

در روش دوم از کاربرد روش‌های احتمالاتی و زمین‌آماری در شبیه‌سازی مکان و زمان غلظت آلاینده استفاده می‌شود. از مزیت‌های این روش می‌توان به کاهش حجم محاسبات و از معایب آن می‌توان به محدودیت در شناسایی تعداد منابع آلاینده اشاره کرد. در همین راستا در حل معکوس معادله انتقال آلودگی در رودخانه با استفاده از روش احتمال برگشتی (Backward probability method) تحقیقاتی توسط پژوهشگرانی انجام شد. در سال ۲۰۱۶ قانع و همکاران [8] با استفاده از این روش محل و زمان انتشار منبع آلاینده را محاسبه کردند و نشان دادند که این روش دقت محاسباتی مناسبی دارد. همچنین این پژوهشگران در پژوهشی دیگر دقت خوب این روش در شناسایی زمان انتشار و محل منبع آلاینده در رودخانه را نشان دادند. در پژوهشی دیگر چنگ و جیا [9] در سال ۲۰۱۰ با استفاده از روش احتمال برگشتی در پهنه‌های آب‌های سطحی و با شرایط جریان غیریکنواخت و ماندگار و در حالت دوبعدی موفق به تشخیص مکان و زمان رهاسازی ماده آلاینده در رودخانه شدند و با صحت‌سنجی این روش با داده‌های واقعی دقت خوب این روش را نشان دادند. نیوپار و ویلسون [10] در سال ۲۰۰۵ با روش احتمالات برگشتی، کاپولا و همکاران [11] در سال ۲۰۱۵ با روشی مبتنی بر روش‌های زمین‌آماري و در سال ۲۰۱۸ وانگ و همکاران [12] با استفاده از روش احتمال برگشتی و مدل رگرسیون خطی (Linear regression method) در همین راستا تحقیقاتی انجام دادند.

در روش سوم با استفاده از چارچوب‌های ریاضی شبیه‌سازی انجام می‌گیرد. روش‌های ریاضی به دلیل کاهش زمان محاسبات، کاهش تعداد دفعات اجرا مدل و حذف کامل تکرارها مزیت بیشتری نسبت به روش شبیه‌سازی-بهینه‌سازی دارد و از معایب

این روش می‌توان به پیچیدگی حل مسئله نسبت به سایر روش‌ها اشاره کرد. در حل معادله انتقال و انتشار با استفاده از روش ریاضی می‌توان به حل معکوس معادله انتقال آلودگی در رودخانه با ضرایب متغیر با استفاده از روش شبه معکوس‌پذیری اشاره کرد. لوشابی در پژوهشی به حل معکوس معادله یک‌بعدی انتقال آلودگی با ضرایب متغیر پرداخته است که با استفاده از حل شبه معکوس‌پذیری معادله جابه‌جایی-پراکندگی و یک مدل عددی، داده‌های سری زمانی غلظت آلاینده تخلیه‌شده در رودخانه محاسبه و بازسازی شده است [13]. در سال ۲۰۲۰ پرمون [14] نیز در پژوهشی به حل معادله انتقال آلودگی با استخراج راه‌حل تحلیلی توسط روش شبه معکوس‌پذیری پرداخت که با افزودن ترم پایداری شبیه‌سازی معادله جابه‌جایی-پراکندگی را انجام داد. نتایج نشان داد که این روش در الگوهای ساده بسیار دقیق عمل می‌کند و در الگوهای پیچیده میزان خطا افزایش می‌یابد. با استفاده از این روش پژوهش‌هایی توسط اسکاگاس و کابالا [15] در سال ۱۹۹۵ و ژانگ و وانگ [16] در سال ۲۰۱۱ به شبیه‌سازی معادله انتقال آلاینده پرداختند. از روش‌های عددی و تحلیلی مختلف دیگری همچون روش تنظیم تیخونوف، روش تابع گرین، تبدیل لاپلاس و غیره جهت حل معکوس معادله انتقال آلودگی در رودخانه با شرایط مختلف استفاده شده است که در همین راستا نیوپار و همکاران در سال ۲۰۰۰ با استفاده از روش تیخونوف (Tikhonov regularization method)، 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 [3,17].

با توجه به اینکه در این پژوهش برای حل معکوس معادله انتقال آلودگی از طرح معکوس حافظ گروه (Backward Group Preserving Scheme) استفاده شده است، در اینجا به صورت مختصر به تحقیقات مختلف که توسط طرح حافظ گروه (Preserving Scheme) صورت گرفته پرداخته می‌شود.

لئو [18] در سال ۲۰۰۴ با استفاده از طرح حافظ گروه به حل معکوس معادله انتقال حرارت پرداخت. در این جل با استفاده از شرایط مرزی دیریکله (Dirichlet) در یک دامنه فضایی مشخص، ابتدا با استفاده از روش نیمه گسسته‌سازی به جداسازی معادله انتقال حرارت پرداخت و پس از تبدیل معادله دیفرانسیل جزئی به معادله دیفرانسیل معمولی، با استفاده از طرح معکوس حافظ

گروه و با حل سیستم‌های دینامیکی به یک معادله کلی دست‌یافت که با استفاده از آن به حل معادله دیفرانسیل به‌دست‌آمده در حالت یک‌بعدی و دوبعدی پرداخت و نتایج روش طرح معکوس حافظ گروه را برای شرایط مختلف سنجید و رنج پایداری را برای این معادله تعیین کرد. در سال ۲۰۱۰ لیو و چانگ [19] با فرض ثابت بودن ضریب پراکندگی در نواحی متناظر و با استفاده از روش عددی خطوط و طرح معکوس حافظ گروه، به‌منظور شناسایی ویژگی‌های منبع آلودگی شامل محل منبع آلاینده، بازیابی تاریخچه انتشار و توزیع فضایی غلظت آلاینده در فضای یک-بعدی به حل معکوس معادله انتقال آلودگی در آب‌های زیرزمینی پرداختند. همچنین دو روش طرح معکوس حافظ گروه و MJBBE (Marching-Jury Backward Beam Equation) را باهم مقایسه کردند که نشان دادند طرح معکوس حافظ گروه در حل عددی معادله انتقال آلودگی و گرما نتایج بسیار دقیقتری به دست می‌دهد. در پژوهشی دیگر که در سال ۲۰۱۴ چانگ و کو [20] انجام دادند با استفاده از طرح معکوس حافظ گروه به حل معادله غیرخطی کلاین-گوردون پرداختند. در این پژوهش آنها معادله بد وضع و دوبعدی کلاین-گوردون را، پس از جداسازی با شرایط مرزی معین و تبدیل آن به معادله دیفرانسیل معمولی با استفاده از طرح معکوس حافظ گروه حل کردند و سپس پایداری این روش را مورد بررسی قرار دادند و نتایج بسیار مطلوبی از روش طرح حافظ گروه به دست آوردند. در سال ۲۰۱۱ عباس بندی و هاشمی [21] معادله لاپلاسی را که از معادلات دیفرانسیل جزئی بدخیم است با استفاده از روش نیمه گسسته‌سازی به معادله دیفرانسیل معمولی تبدیل کردند و سپس با استفاده از طرح حافظ گروه به بررسی و حل معادله پرداختند. نتایج کار موفق بودن ترکیب روش خطوط و طرح حافظ گروه برای به دست آوردن جواب معادله لاپلاس بدخیم را نشان داد. در پژوهشی دیگر گاوو و همکاران [22] در سال ۲۰۱۹ قدرت طرح حافظ گروه در شبیه‌سازی مدل کلاین-گوردون که از مسائل بد وضع می‌باشد را نشان دادند. آنها به کمک روش عددی خطوط و تبدیل معادله دیفرانسیل جزئی به معادله دیفرانسیل معمولی و شبیه‌سازی آن با استفاده از طرح حافظ گروه کارآمد بودن این روش در حل معادله کلاین-گوردون در حالت یک‌بعدی و دوبعدی را نشان دادند.

طرح معکوس حافظ گروه برای حل معادله جابه‌جایی-پراکندگی در حالت یک‌بعدی و ضرایب متغیر، در رودخانه برای شناسایی تابع شدت منبع آلاینده از مزایای این روش استفاده کافی شود. از مزیت‌های این روش می‌توان به عدم استفاده از ترم پایداری در حل معکوس معادله انتقال آلودگی اشاره کرد و مشکلاتی همچون انتخاب و بهینه‌سازی ترم پایداری را ندارد. مزیت دیگر این روش، برخلاف سایر روش‌های عددی، عدم نیاز به تقسیم‌بندی رودخانه به بازه‌های زیاد می‌باشد که با توجه به وقتگیر بودن و هزینه زیاد داده‌برداری این نکته اهمیت زیادی دارد. در واقع همگرا شدن با تعداد بازه‌های کم یا گام زمانی یکی از محاسن این روش است که در این پژوهش نیز این امر اتخاذ شده است. سرعت و دقت بالای این مدل از دیگر مزیت‌های مهم است که می‌توان به آن اشاره کرد.

### مبانی تئوری و روش‌ها

در این پژوهش به کمک طرح حافظ گروه که روشی بر پایه گروه‌های لی می‌باشد به حل مستقیم و معکوس معادله انتقال آلودگی در رودخانه پرداخته می‌شود. در این بخش ابتدا طرح حافظ گروه که جهت حل مستقیم معادله انتقال آلودگی کاربرد دارد معرفی گردیده و در ادامه به معرفی طرح معکوس حافظ گروه که برای حل معکوس این معادله کاربرد دارد پرداخته می‌شود. در انتها معادله جابه‌جایی-پراکندگی به صورت مستقیم و معکوس با استفاده از این روش حل شده است. در این پژوهش جهت حل مسئله ابتدا با روش عددی مستقیم معادله انتقال آلودگی در یک بعد حل می‌شود و سپس نتایج به دست آمده ورودی مرحله دوم محاسبات (حل معکوس معادله انتقال آلودگی) را تأمین می‌کند و نتایج نهایی (تابع شدت آلاینده) محاسبه می‌شود.

با توجه به شکل (۱) مدل‌سازی انتقال و انتشار آلاینده در رودخانه با فرض تقسیم رودخانه به  $n$  بازه انجام می‌گیرد، طول هر قسمت رودخانه  $L_1, L_2, \dots, L_{n-1}, L_n$  می‌باشد. همان‌طور که در شکل (۱) مشاهده می‌شود غلظت از بالادست به سمت پایین دست (غلظت از مکان  $x=0$  به  $x=L$ ) حرکت می‌کند و ترتیب زمانی در حل مستقیم از  $t_1$  به  $t_3$  و در حل معکوس از  $t_3$  به  $t_1$  می‌باشد. در روش مستقیم با داشتن الگوی غلظت رودخانه

چانگ و لیو [23] در سال ۲۰۱۴ با استفاده از طرح معکوس حافظ گروه در محیط ناهمگن، به حل معکوس معادله چندبعدی و غیرخطی موج (backward wave problems) که جزو معادلات دیفرانسیل بدخیم است پرداختند. آنها پس از اعمال شرایط مرزی و جداسازی به روش نیمه گسسته‌سازی و تبدیل معادله موج به معادله دیفرانسیل معمولی، با استفاده از طرح معکوس حافظ گروه به حل آن پرداختند. در ادامه با حل مثال‌هایی پایداری و نتایج این روش بر روی معادلات چندبعدی و بدخیم را بررسی کردند. بر این اساس با مثال‌های عددی نشان دادند که طرح معکوس حافظ گروه برای سیستم‌های غیرخطی چندبعدی و حتی برای آن دسته از معادلات که به شدت بدخیم هستند قابل استفاده است و همچنین نشان دادند که طرح معکوس حافظ گروه می‌تواند نتایج صحیح و دقیقی را تولید کند و پیاده‌سازی این روش در شرایط زمانی معین به‌خوبی قابل اجرا است. در سال ۲۰۱۶ شن [24] با استفاده از طرح حافظ گروه به حل معکوس معادله غیرخطی و ناهمگن انتقال حرارت پرداخت که جزو معادلات دیفرانسیل بدخیم می‌باشد. شن برای تبدیل این معادله به معادلات دیفرانسیل معمولی از جداسازی به روش نیمه گسسته‌سازی استفاده کرد و با استفاده از طرح حافظ گروه به حل آن پرداخت و همچنین با مثال‌هایی تحت شرایط مختلف پایداری و جواب‌ها را بررسی کرد و نتیجه گرفت که طرح حافظ گروه بسیار دقیق، پایدار، مؤثر و حساس به داده‌های نهایی هستند و همچنین سرعت‌های همگرایی سریعی دارند. روش‌هایی نیز برای تخمین ضریب پراکندگی طولی ارائه شده است که در همین راستا می‌توان به پژوهشی که نوری و همکاران [25] در سال ۲۰۱۷ انجام دادند اشاره کرد. در این پژوهش با استفاده از مدل محاسبه دانه‌ای که بر مبنای روش عددی می‌باشد، به تخمین ضریب پراکندگی طولی در رودخانه پرداختند. در پژوهشی دیگر در سال ۲۰۱۹ رضایی و همکاران [26] نیز با استفاده از راه حلی بر مبنای تفاضل محدود روشی برای محاسبه ضریب پراکندگی ارائه کردند.

با توجه به پژوهش‌هایی که تاکنون انجام گرفته، حل معکوس معادله انتقال آلودگی در رودخانه با ضرایب متغیر به صورت محدود صورت گرفته است و طبق بررسی‌های صورت گرفته هیچ مطالعه‌ای در خصوص روش شناسایی تابع شدت منبع آلاینده در آب‌های سطحی با استفاده از طرح معکوس حافظ گروه انجام نشده است. پس در این تحقیق سعی بر آن شده تا با اعمال

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

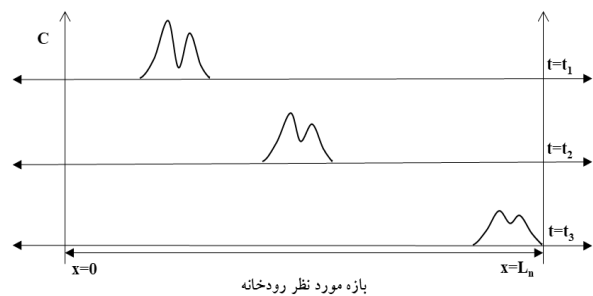
گفتنی است که در این مسئله از ضریب زوال واکنش و ترم منبع صرف نظر شده است. شرایط مرزی و انتهایی برای حل عددی معکوس معادله جا به جایی-پراکندگی در رودخانه به صورت زیر در نظر گرفته می شود:

$$\begin{aligned} C(0, t) &= 0 & 0 \leq t \leq T \\ \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=L} &= 0 & 0 \leq t \leq T \\ C(x, t) &= C_T(x) & 0 \leq x \leq L \end{aligned} \quad (3)$$

که  $C_T(x)$  شرط انتهایی یا توزیع مکانی توده مشاهده شده در زمان  $T$  است و  $L$  طول رودخانه می باشد. در تحقیق مورد نظر ضریب پراکندگی به صورت متغیر مدنظر است. در این تحقیق از مدل های محاسبات جریان که در آنها از معادلات سنت و نانت استفاده شده است برای محاسبه، سرعت، عمق، مساحت جریان و غیره با ضرایب متغیر استفاده می شود. روش های مختلفی برای تعیین ضریب پراکندگی طولی وجود دارد. از جمله این روش ها می توان به استفاده از روابط تجربی ارائه شده توسط محققان مختلف و انجام آزمایش میدانی توسط ماده ردیاب و روابط مختلف دیگر اشاره نمود.

پس از به دست آوردن پارامترهای جریان، به حل مستقیم معادله جا به جایی-پراکندگی به وسیله روش عددی خطوط (The numerical method of lines) و طرح حافظ گروه پرداخته می شود. روش عددی خطوط مفهوم ساده ای دارد که در واقع دستگاه معادلات دیفرانسیل جزئی را به غیر از یک متغیر مستقل گسسته سازی می کند. روند نیمه گسسته سازی دستگاهی از معادلات دیفرانسیل معمولی را نتیجه می دهد که به صورت عددی می توان آنها را حل کرد. پس از جداسازی معادله (۱) که با روش نیمه گسسته سازی انجام می شود، حاصل گسسته سازی دستگاه معادلات دیفرانسیل معمولی می شود که می توان با به کارگیری

در بالادست (سری زمانی) و یا الگوی غلظت در زمان ابتدایی و در تمام مکان ها (پروفیل مکانی) غلظت رودخانه در پایین دست محاسبه می شود. در این روش مدل به صورت برگشتی عمل می کند یعنی با داشتن الگوی غلظت در زمان انتهایی (پروفیل مکانی در زمان  $T$ )، غلظت در زمان ابتدایی محاسبه می شود. جهت استخراج پروفیل مکانی در زمان انتهایی نیاز به داده برداری در طول رودخانه می باشد که در این پژوهش به دلیل عدم دستیابی به داده های واقعی، از حل مستقیم معادله انتقال آلودگی استفاده می شود.



شکل ۱ نیمرخ مکانی غلظت آلاینده در رودخانه در بازه ۰ تا  $L_n$

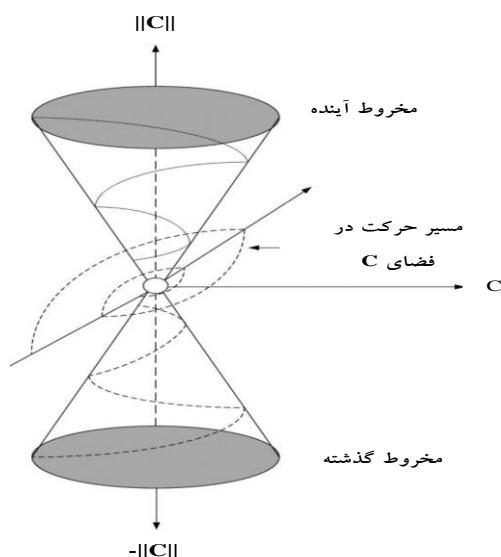
در روش مستقیم با داشتن سری زمانی (الگو غلظت در مکان اولیه و در تمام زمان ها) و یا پروفیل مکانی (الگوی غلظت در زمان ابتدایی و در تمام مکان ها) می توان غلظت رودخانه در پایین دست را محاسبه کرد. دقت محاسبات این دو روش بستگی به شرایط مختلفی دارد که نوع الگو یکی از مهمترین عوامل تأثیرگذار بر دقت می باشد. معادله جا به جایی-پراکندگی در تحقیق حاضر به صورت یک بعدی به صورت زیر بررسی می گردد [2]:

$$\frac{\partial(AC)}{\partial t} = - \frac{\partial(QC)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left( AD \frac{\partial C}{\partial x} \right) - AkC + AS \quad (1)$$

در معادله (۱)،  $A$  سطح مقطع رودخانه،  $D$  ضریب پراکندگی در جهت طولی،  $k$  ضریب زوال ماده آلاینده و  $S$  ترم منبع می باشد. از آنجا که معادله فوق از دسته معادلات دیفرانسیل جزئی بدخیم می باشد برای تبدیل آن به دستگاه معادلات دیفرانسیل معمولی از روش عددی خطوط استفاده می شود که پس از گسسته سازی معادله فوق به روش تفاضل مرکزی (Central Difference) معادله زیر حاصل می شود که با پارامتر  $f_j$  نمایش داده شده است.

در معادلات فوق  $I_n$  تابع همانی از مرتبه  $n$  و  $T$  نمایانگر ترانهاده است.

معادله (۶) دامنه جواب در فضای مینکوفسکی را تعیین می‌کند که نتیجه آن مخروط پوچ (Null cone) شکل (۲) می‌شود [27]. با در نظر گرفتن زمان مثبت در حل مستقیم و منفی زمان منفی در حل معکوس مخروط به دو قسمت مثبت و منفی که اصطلاحاً به آنها مخروط آینده (Future cone) و مخروط گذشته (Past cone) گفته می‌شود تبدیل می‌شود. شکل (۲) شرط مخروط را نشان می‌دهد که تاکنون شرط مخروط بدیهی‌ترین محدودیتی است که بر روی دستگاه دینامیکی اعمال شده است در واقع می‌توان گفت این شکل محدوده جواب غلظت رودخانه در فضای مینکوفسکی را نشان می‌دهد.



شکل ۲ شرط مخروط و فضای مینکوفسکی افزوده [19]

با تعریف ماتریس  $A$  به صورت زیر

$$A := \begin{bmatrix} 0_{n \times n} & \frac{f(C, t)}{\|C\|} \\ \frac{f^T(C, t)}{\|C\|} & 0 \end{bmatrix} \quad (8)$$

و ثابت در نظر گرفتن آن، مقدار آن در گام  $j$ ام محاسبه می‌شود. با نوشتن نگاشت نمایی برای ماتریس  $A(j)$  در فاصله  $t_j \leq t \leq t_j + \Delta t_j$  هنگامی که  $t = t_j$  است رابطه زیر حاصل می‌شود [27]:

طرح حافظ گروه به حل این معادله پرداخت. طرح حافظ گروه از فضای افزوده به نام فضای مینکوفسکی (Minkowski) استفاده می‌کند. تفاوت اساسی مابین طرح حافظ گروه و روش‌های عددی دیگر این است که در روش‌های قبلی از فضای اقلیدسی  $R^n$  استفاده می‌شود در حالی که در طرح حافظ گروه از فضای مینکوفسکی  $M^{n+1}$  استفاده می‌شود. در واقع بعد دستگاه در فضای مینکوفسکی یک مرتبه افزایش پیدا می‌کند. یکی از مزایای استفاده از فضای مینکوفسکی در طرح حافظ گروه، اجتناب از جواب‌های جعلی (Spurious) و نقاط ثابت غیرواقعی (Ghost fixed points) است.

طرح گروه حافظ در واقع گروه تقارنی دستگاه مورد بحث را حفظ می‌کند. برای دستگاه معادلات دیفرانسیل  $n$  بعدی به صورت

$$\dot{C} = f(C, t), \quad C \in \mathbb{R}^n, \quad t \in \mathbb{R}^+ \quad (4)$$

که در این معادله  $C$  بردار  $n$  بعدی است،  $t$  یک متغیر زمانی است  $f$  تابعی با مقدار بردار از  $C$  و  $t$  که میدان برداری نامیده می‌شود. برای سیستم‌های معادلات دیفرانسیل غیرخطی، معادلات را در دستگاه‌های دینامیکی تقویت شده جای داده می‌شود. می‌توان معادله بالا را به یک دستگاه دینامیکی افزوده  $n+1$  بعدی تبدیل کرد [27].

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} C \\ \|C\| \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0_{n \times n} & \frac{f(C, t)}{\|C\|} \\ \frac{f^T(C, t)}{\|C\|} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ \|C\| \end{bmatrix} \quad (5)$$

به‌وضوح اولین معادله در (۵) همان معادله (۴) اما دومین معادله ساختار را برای متغیرهای افزوده  $X := (C^T, \|C\|)^T$  برقرار می‌کند که در شرط مخروط مینکوفسکی

$$X^T g X = 0 \quad (6)$$

صدق می‌کند که  $g$  یک متر مینکوفسکی (metric Minkowski) است و به صورت زیر نشان داده می‌شود [27].

$$g = \begin{bmatrix} I_n & 0_{n \times 1} \\ 0_{1 \times n} & -1 \end{bmatrix} \quad (7)$$



مانند روش مستقیم ادامه مسیر با گام زمانی منفی برای روش معکوس نوشته می شود که همان نتیجه قبل را می دهد بنابراین مانند روش مستقیم با این کار می توان دستگاه دینامیکی اصلی  $n$  بعدی در  $R^n$  را به دستگاه دینامیکی  $n+1$  بعدی در  $M^{n+1}$  متناظر کرد که در نهایت با بسط دادن ماتریس  $A(j)$  و نوشتن نگاشت نمایی برای آن، معادله زیر حاصل می شود که به کمک آن می توان به حل معادلات دیفرانسیل معمولی به صورت معکوس پرداخت.

$$C_{j+1} = C_j + \frac{(a_j - 1) f_j \cdot C_j - b_j \|C_j\| \cdot \|f_j\|}{\|f_j\|^2} f_j \quad (15)$$

در معادله فوق  $C_j$  غلظت رودخانه در زمان  $t$  و  $C_{j+1}$  غلظت در زمان  $t+1$  می باشد.  $a_j$ ،  $b_j$  نیز به صورت زیر تعریف می شوند و  $f_j$  با استفاده از روش عددی خطوط محاسبه می شود که نتیجه آن در معادله (۲) نمایش داده شده است [27].

$$\exp[\Delta t A(j)] = \begin{bmatrix} I_n + \frac{(a_j - 1)}{P f_j P^T} f_j f_j^T & \frac{b_j f_j}{P f_j P} \\ \frac{b_j f_j^T}{P f_j P} & a_j \end{bmatrix} \quad (9)$$

که با استفاده از رابطه  $f_j = f(C_j, t_j)$  و جایگذاری  $\exp[\Delta t A(j)]$  به جای  $G(j)$  در رابطه  $C_{j+1} = G(j) C_j$  که یکی از فواید طرح حافظ گروه است، معادله زیر حاصل می شود [27]:

$$C_{j+1} = C_j + \frac{(a_j - 1) f_j \cdot C_j + b_j \|C_j\| \cdot \|f_j\|}{\|f_j\|^2} f_j \quad (10)$$

در معادله فوق  $C_j$  غلظت رودخانه در زمان  $t$  و  $C_{j+1}$  غلظت در زمان  $t+1$  می باشد.  $a_j$ ،  $b_j$  نیز به صورت زیر تعریف می شوند و  $f_j$  با استفاده از روش عددی خطوط محاسبه می شود که نتیجه آن در معادله (۲) نمایش داده شده است [27].

$$a_j := \cosh\left(\frac{\Delta t \|f_j\|}{\|C_j\|}\right) \quad (11)$$

$$b_j := \sinh\left(\frac{\Delta t \|f_j\|}{\|C_j\|}\right) \quad (12)$$

برای حل معادلات دیفرانسیل معمولی به صورت معکوس با استفاده از طرح معکوس حافظ گروه، معادله (۴) با گام های زمانی منفی به صورت معکوس در زمان حل می شود. پس برای دستگاه معادلات دیفرانسیل  $n$  بعدی به صورت معکوس معادله (۴) به شکل زیر نوشته می شود:

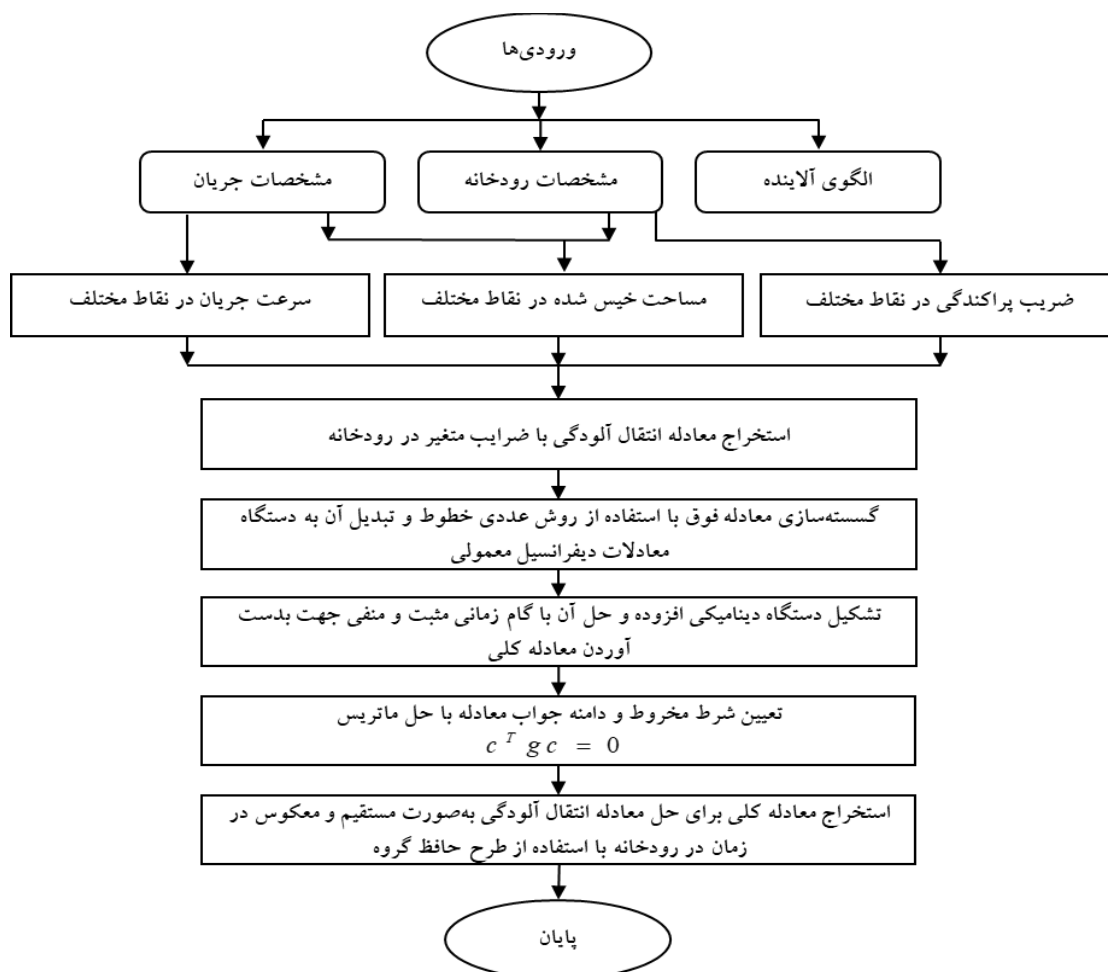
$$\mathcal{C} = f(C, t), \quad C \in \mathbb{R}^n, \quad t \in \mathbb{R}^- \quad (13)$$

با یک مقدار نهایی  $C$  مشخص در  $t=0$ ، هدف بازایی مقادیر گذشته  $C$  در زمان گذشته  $t < 0$  می باشد. همانند روش مستقیم، معادلات در سیستم های دینامیکی تقویت شده جای داده می شود. می توان معادله بالا را به یک دستگاه دینامیکی افزوده  $n+1$  بعدی تبدیل کرد [27].

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} C \\ -\|C\| \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0_{n \times n} & -\frac{f(C, t)}{\|C\|} \\ -\frac{f^T(C, t)}{\|C\|} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ -\|C\| \end{bmatrix} \quad (14)$$

## نتایج و بحث

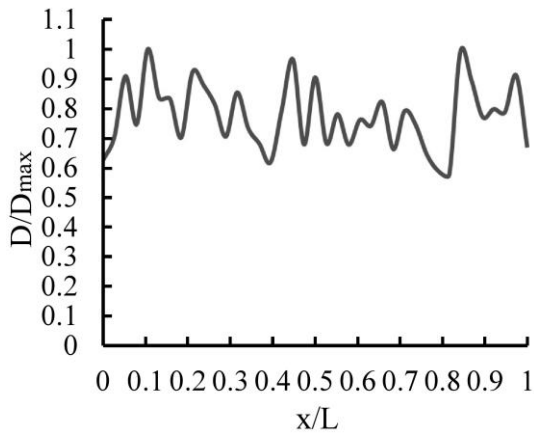
سه مثال جهت ارزیابی روش مستقیم و معکوس حافظ گروه طراحی شده است. این سه مثال به خوبی دقت این روش را نشان می دهند. با توجه به اینکه در این پژوهش معادله انتقال آلودگی با ضرایب متغیر حل شده است، ابتدا باید پارامترهای جریان محاسبه شود که این پارامترها با حل معادلات جریان و با استفاده از مدل های موجود به دست آمده است. مشخصات رودخانه با توجه به مثال های واقعی در نظر گرفته شده است و با استفاده از مدل های محاسبات جریان پارامترهای دبی، عمق، سرعت، مساحت جریان و دیگر پارامترها در نقاط مختلف رودخانه به دست آمده است. روش های مختلفی نیز جهت تعیین ضریب پراکندگی وجود دارد که در این پژوهش از روابط تجربی موجود استفاده شده است. جدول (۱) مشخصات و سایر پارامترهای هر مثال و شکل (۴)، (۵) و (۶) سرعت، ضریب پراکندگی و مساحت جریان نسبت به طول رودخانه را نشان می دهد.



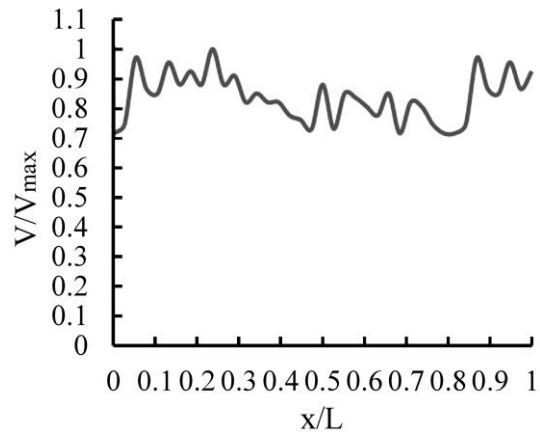
شکل ۳ فرایند مدل‌سازی عددی انتقال آلاینده در رودخانه با ضرایب متغیر

جدول ۱ مشخصات و پارامترهای هر مثال

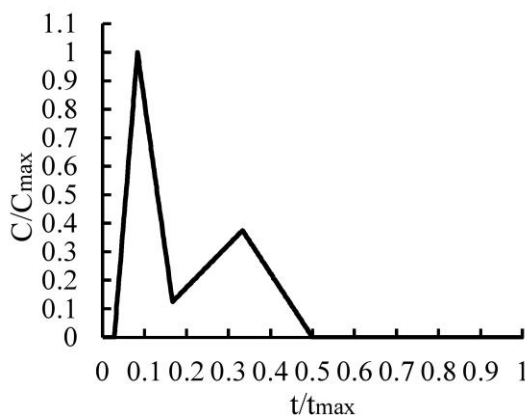
پارامتر / مثال	طول L(km)	دبی Q(m <sup>3</sup> /s)	الگو آلاینده	ضرایب	هدف
مثال اول	۲۰	۱۵	مثلث دو قله (نامنظم)	متغیر	حل مستقیم / بازسازی شدت آلاینده و پروفیل مکانی در پایین‌دست
مثال دوم	۲۰	۱۵	نمایی دو قله (نامنظم)	متغیر	حل معکوس / بازسازی شدت آلاینده و پروفیل مکانی در بالادست
مثال سوم	۲۰	۱۵	مثلث دو قله (نامنظم)	متغیر	حل معکوس / بازسازی شدت آلاینده و پروفیل مکانی در بالادست



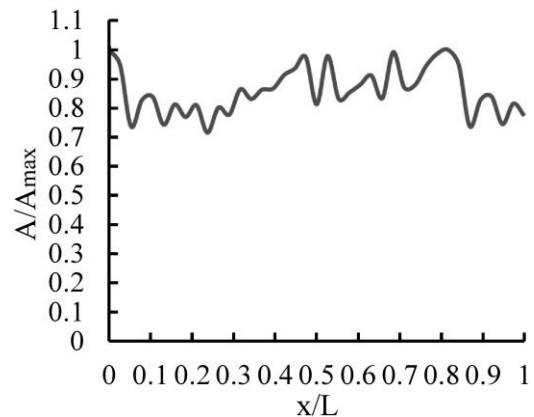
شکل ۵ تغییرات ضریب پراکندگی در راستای طولی رودخانه



شکل ۴ تغییرات سرعت در راستای طولی رودخانه



شکل ۷ منحنی سری زمانی غلظت آلاینده در مرز ورودی



شکل ۶ تغییرات مساحت جریان در راستای طولی رودخانه

پروفیل مکانی در زمان‌های مختلف، نتایج حاصل از مدل معکوس با مدل مستقیم مقایسه می‌شود. با توجه به اینکه برداشت هرگونه داده‌ای بدون خطا امکان‌پذیر نیست برای محاسبات و اندازه‌گیری شدت آلاینده در این مثال‌ها میزان خطاهای مختلفی در نظر گرفته شده است. این خطاها به نتایج حاصل از روش مستقیم که ورودی روش معکوس است اعمال شده تا پاسخ‌های به دست آمده نزدیک به واقعیت باشند. به همین منظور خطای ۵ تا ۱۵ درصد به پروفیل مکانی غلظت آلاینده در زمان انتهایی اعمال شده است. در انتها برای مقایسه این دو حل 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.

**مثال اول: کاربرد طرح مستقیم حافظ گروه در رودخانه با استفاده از سری زمانی.** این مثال به منظور ارزیابی طرح مستقیم حافظ گروه طراحی شده است. در این مثال رودخانه پس از

ابتدا با حل مستقیم طرح حافظ گروه با استفاده از سری زمانی به منظور شبیه‌سازی روش مستقیم و نشان دادن دقت عمل این روش از شرایط مرزی غلظت ورودی به رودخانه مطابق شکل (۷) و شرط مرزی غلظت خروجی  $\frac{\partial C}{\partial x}\bigg|_{x=L} = 0$  در نظر گرفته شده است و پس از شبیه‌سازی برای ارزیابی این روش از حل عددی تمام ضمنی (Fully implicit) تفاضل محدود (Finite difference) استفاده شده است.

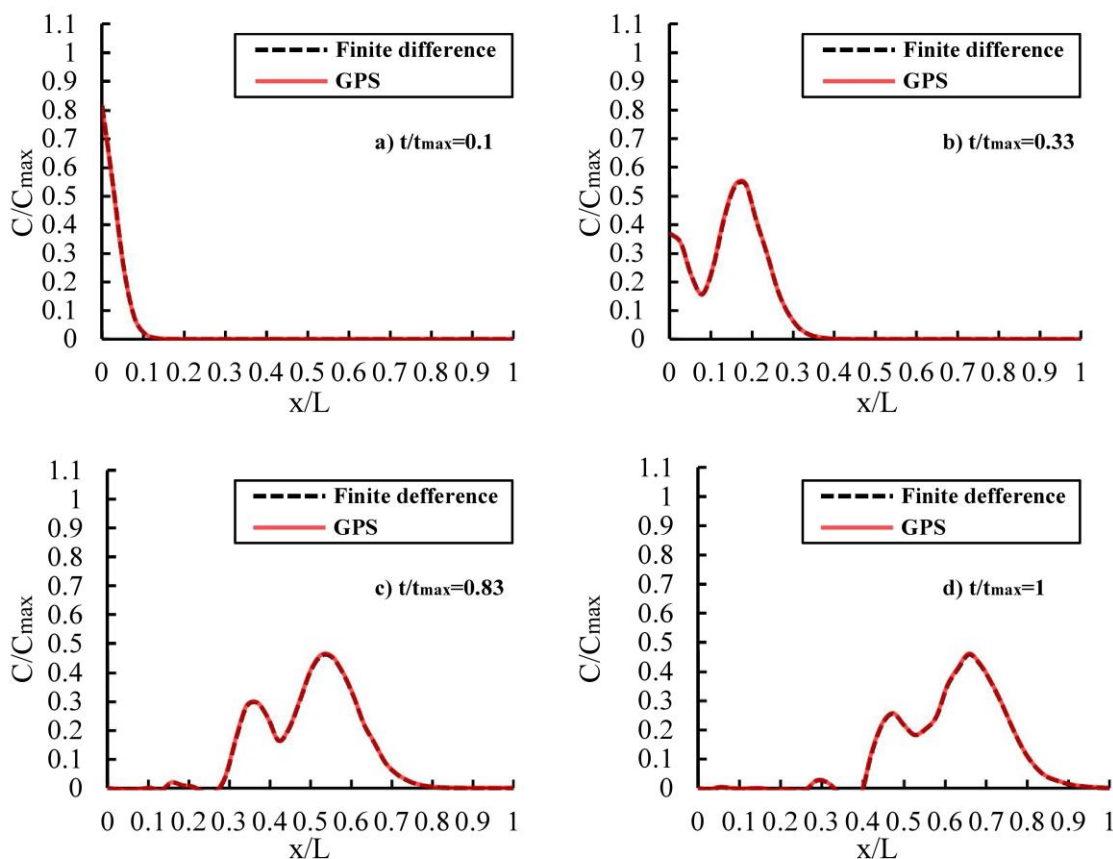
جهت حل معکوس معادله انتقال آلودگی نیاز به پروفیل طولی یا مکانی است که برای به دست آوردن این پروفیل باید غلظت آلاینده در بازه‌های مشخص در یک زمان خاص از رودخانه به دست آید که در این پژوهش به دلیل عدم دستیابی به داده‌های واقعی، با استفاده از حل مستقیم پروفیل مکانی در زمان انتهایی به دست می‌آید. در واقع خروجی مدل مستقیم به عنوان ورودی مدل معکوس در نظر گرفته می‌شود و به منظور صحت-سنجی مدل معکوس، پس از شبیه‌سازی مدل معکوس و بازسازی

جدول (۲) 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 طرح مستقیم حافظ گروه و تطابق نسبت کامل این روش با روش تمام ضمنی تفاضل محدود می‌باشد

جدول ۲ شاخص‌های آماری مثال اول

مقدار	شاخص آماری
0.05	MAE(kg/m <sup>3</sup> )
99.997	R <sup>2</sup> (%)
0.02	RMSE(kg/m <sup>3</sup> )
0.23	MRE(%)

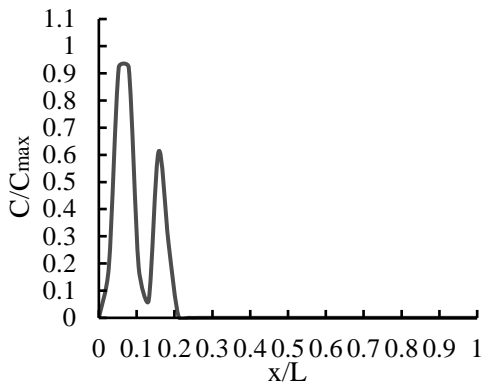
تقسیم به ۳۹ بازه ۴۰۰ متری و اعمال غلظت ورودی در مرز رودخانه، غلظت در بازه‌های مختلف محاسبه شده است. در این مثال مدل در چهار زمان بی‌بعد شده (۰،۱۰)، (۰،۳۳)، (۰،۸۳) و (۱) شبیه‌سازی شده و نتایج در شکل (۸) نمایش داده شده است. همچنین نتایج ارزیابی با حل عددی تمام ضمنی تفاضل محدود با استفاده از شاخص‌های آماری در جدول (۲) آورده شده است. با توجه به شکل (۸) دقت طرح مستقیم حافظ گروه در حل معادله انتقال آلودگی با ضرایب متغیر در رودخانه بسیار خوب بوده و همان‌طور که در شکل (۸) مشاهده می‌شود این حل انطباق نسبتاً کاملی با حل تمام ضمنی تفاضل محدود دارد. قله‌ها به‌خوبی بازسازی شده‌اند و باگذشت زمان نیز خللی در بازسازی قله‌ها در پایین‌دست رودخانه ایجاد نشده است و انطباق این دو روش در تمام زمان‌های شبیه‌سازی حفظ شده است. همان‌طور که در



شکل ۸ مقایسه طرح مستقیم حافظ گروه با روش تمام ضمنی تفاضل محدود

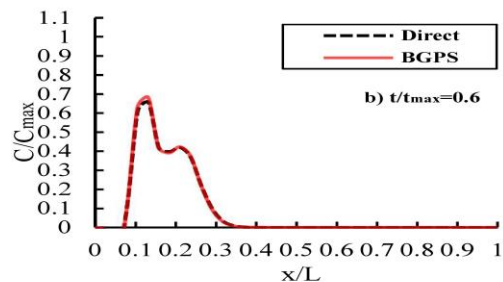
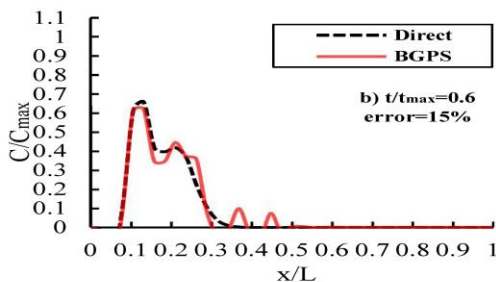
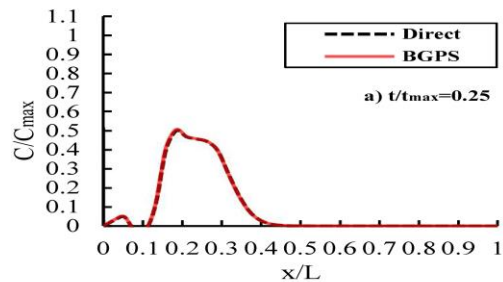
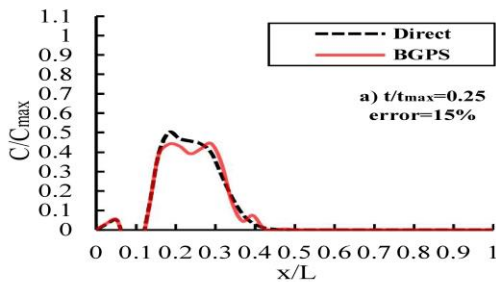
جدول ۳ شاخص‌های آماری در حالت‌های مختلف مثال دوم

خطا / شاخص	error 0%	error 5%	error 10%	error 15%
MAE(kg/m <sup>3</sup> )	0.19	0.38	0.59	0.77
R <sup>2</sup> (%)	99.62	97.01	95.89	94.04
RMSE(kg/m <sup>3</sup> )	0.08	0.17	0.25	0.39
MRE(%)	3.54	6.39	8.75	12.56



شکل ۹ پروفیل مکانی (شرایط ابتدایی) مدل مستقیم

**مثال دوم: کاربرد طرح معکوس حافظ گروه در رودخانه با استفاده از پروفیل مکانی.** با توجه به اینکه ثبت داده‌ها همیشه دارای خطا است، بنابراین بر روی داده‌های ورودی مدل معکوس (پروفیل مکانی) ۵ تا ۱۵ درصد خطا به صورت کاملاً تصادفی اعمال شده است تا بتوان اثر این خطاها را در پاسخ مشاهده کرد. در این مثال پروفیل مکانی ورودی مدل معکوس با استفاده از شرایط ابتدایی (conditions Initial) در شکل (۹) به دست آمده است و 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. در این مثال دوم نتایج در سه زمان بی‌بعد شده (۰,۲۵)، (۰,۶) و (۱) آورده شده است. نتایج بدون در نظر گرفتن خطا در شکل (۱۰) و پس از اعمال درصد خطا ۱۵٪ بر روی ورودی مدل در شکل (۱۱) نمایش داده شده است. مدل با استفاده از شاخص‌های آماری با حل مستقیم ارزیابی شده که نتایج در جدول (۳) ارائه شده است.



شکل ۱۱ مقایسه طرح معکوس حافظ گروه با روش مستقیم با اعمال خطا ۱۵٪

شکل ۱۰ مقایسه طرح معکوس حافظ گروه با روش مستقیم بدون اعمال خطا

در این مثال چون مدل مستقیم با استفاده از شرط ابتدایی اجرا شده است مدل معکوس محدودیت زمانی در اجرا مدل ندارد و بازسازی مدل بازگشتی به طور کامل صورت گرفته است. همان طور که از شکل های (۱۰ و ۱۱) پیداست هر چه زمان بیشتری از شبیه سازی می گذرد دقت محاسبات کمتر می شود با این حال همان طور که مشاهده می شود قله ها با دقت بسیار خوبی بازسازی شده اند. دقت مدل می تواند به عواملی همچون تعداد گام های مکانی و زمانی، زمان شبیه سازی، از بین رفتن اثر الگوی ماده آلاینده در رودخانه بستگی دارد که به دلیل تعداد کم گام های زمانی و از بین رفتن اثر دو قله غلظت با گذشت زمان نتیجه بسیار خوبی حاصل شده است. یکی از نقاط قوت این مدل عدم نیاز به تقسیم بندی رودخانه به تعداد بازه های زیاد می باشد که به دلیل مشکل بودن برداشت داده در طول رودخانه این یک مزیت مهم محسوب می شود. همان طور که از مقایسه شکل های (۱۰ و ۱۱) مشاهده می شود با افزایش خطای اعمال شده بر داده های ورودی مدل معکوس میزان دقت بازیابی الگوی آلاینده کم می شود. مقایسه ستون های جدول (۳) نیز نشان می دهد با افزایش خطا مقادیر MAE، RMSE و MRE افزایش پیدا می کند و از میزان  $R^2$  نیز کم می شود که این تغییرات نشان دهنده کاهش دقت محاسبات با افزایش خطا می باشد. همچنین با اعمال خطا، نوسانات غلظت در پایین دست رودخانه در زمان های انتهایی شبیه سازی مشاهده می شود که با افزایش خطا این نوسانات بیشتر می شود. برای نشان دادن دقت روش، نتایج مقایسه با شاخص های آماری در جدول (۳) آورده شده است. همان طور که در جدول (۳) مشاهده می شود شاخص آماری MAE، RMSE و MRE مقادیر کمی دارند که دقت خوب روش معکوس را نشان می دهد همچنین مقدار بالای  $R^2$  نشان دهنده تطابق خوب این دو روش می باشد و حتی این مقادیر هنگام اعمال خطا نیز نتایج خوبی را نشان می دهد که بیانگر این است که در صورت به وجود آمدن خطا، الگوی آلاینده به خوبی بازسازی می شود و نتایج بسیار قابل قبولی به دست می آید.

جدول ۴ شاخص های آماری در حالت های مختلف مثال سوم

خطا/ شاخص	error 0%	error 5%	error 10%	error 15%
MAE(kg/m <sup>3</sup> )	0.26	0.56	0.73	0.91
R <sup>2</sup> (%)	99.22	95.14	94.81	92.09
RMSE(kg/m <sup>3</sup> )	0.11	0.24	0.31	0.45
MRE(%)	4.6	8.2	10.2	14.3

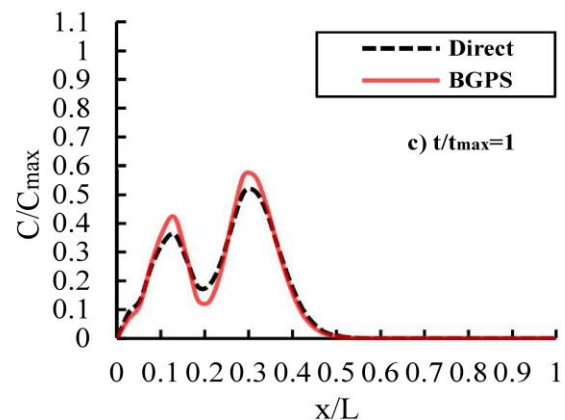
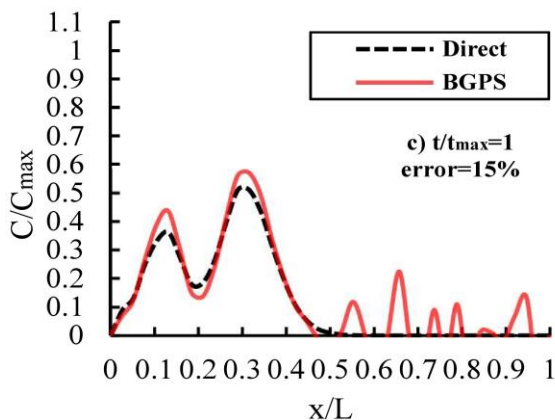
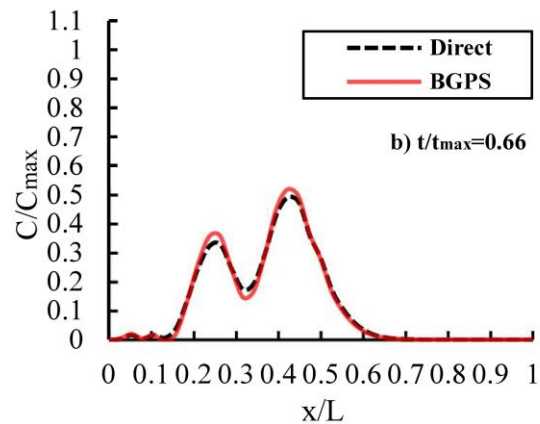
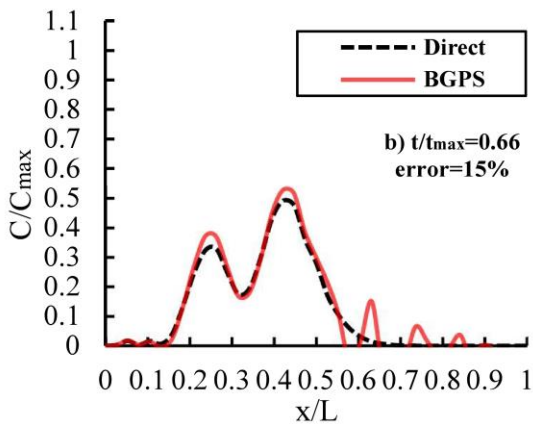
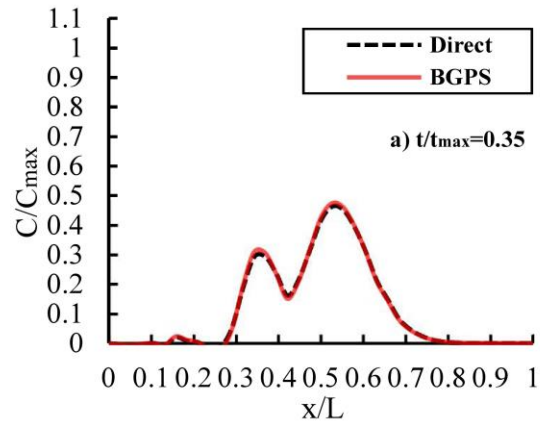
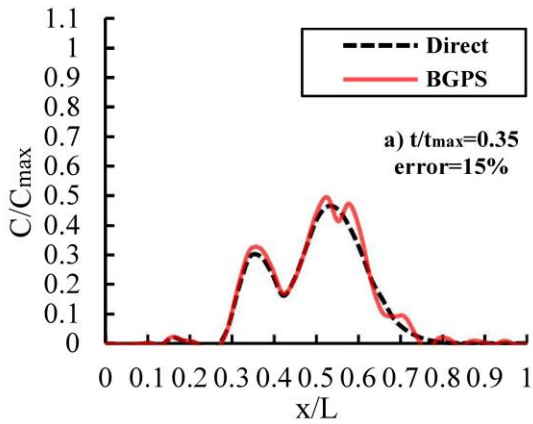
علی رغم اینکه زمان مدل مستقیم بیشتر از مدل معکوس است، مدل معکوس تنها توانایی شبیه سازی نیمی از زمان بوده است یعنی آن قسمت از رودخانه که غلظت از مرز ورودی وارد رودخانه نمی شود بازسازی برگشتی صورت می گیرد که در واقع مهم ترین محدودیت این مدل هست. همان طور که از شکل (۱۲ و ۱۳) پیداست روند بازگشتی به خوبی صورت گرفته است و قله ها با دقت خوبی بازسازی شده اند. همان طور که از شکل های (۱۲ و ۱۳) پیداست هر چه زمان بیشتری از شبیه سازی می گذرد دقت محاسبات کمتر می شود که این کاهش دقت هنگام تشکیل قله ها در زمان انتهایی نیز معلوم است. با توجه به شکل (۱۲ و ۱۳) کاملاً مشهود است که هرچه درصد خطا اعمال شده بر روی پروفیل مکانی بیشتر شود بازسازی مدل برگشتی با دقت کمتری همراه خواهد شد. کاهش مقدار MAE، RMSE و MRE و افزایش مقدار  $R^2$  به خوبی این امر را نشان می دهد. گفتنی است این مقادیر هنگام اعمال خطا نیز نتایج خوبی را نشان می دهد که بیانگر این است که در صورت به وجود آمدن خطا، الگوی آلاینده به خوبی بازسازی می شود و نتایج بسیار خوبی به دست می آید. همچون مثال قبل با اعمال خطا، نوسانات غلظت در پایین دست رودخانه در زمان های انتهایی شبیه سازی مشاهده می شود که با افزایش خطا این نوسانات بیشتر می شود. برای نشان دادن دقت

در این مثال چون مدل مستقیم با استفاده از شرط ابتدایی اجرا شده است مدل معکوس محدودیت زمانی در اجرا مدل ندارد و بازسازی مدل بازگشتی به طور کامل صورت گرفته است. همان طور که از شکل های (۱۰ و ۱۱) پیداست هر چه زمان بیشتری از شبیه سازی می گذرد دقت محاسبات کمتر می شود با این حال همان طور که مشاهده می شود قله ها با دقت بسیار خوبی بازسازی شده اند. دقت مدل می تواند به عواملی همچون تعداد گام های مکانی و زمانی، زمان شبیه سازی، از بین رفتن اثر الگوی ماده آلاینده در رودخانه بستگی دارد که به دلیل تعداد کم گام های زمانی و از بین رفتن اثر دو قله غلظت با گذشت زمان نتیجه بسیار خوبی حاصل شده است. یکی از نقاط قوت این مدل عدم نیاز به تقسیم بندی رودخانه به تعداد بازه های زیاد می باشد که به دلیل مشکل بودن برداشت داده در طول رودخانه این یک مزیت مهم محسوب می شود. همان طور که از مقایسه شکل های (۱۰ و ۱۱) مشاهده می شود با افزایش خطای اعمال شده بر داده های ورودی مدل معکوس میزان دقت بازیابی الگوی آلاینده کم می شود. مقایسه ستون های جدول (۳) نیز نشان می دهد با افزایش خطا مقادیر MAE، RMSE و MRE افزایش پیدا می کند و از میزان  $R^2$  نیز کم می شود که این تغییرات نشان دهنده کاهش دقت محاسبات با افزایش خطا می باشد. همچنین با اعمال خطا، نوسانات غلظت در پایین دست رودخانه در زمان های انتهایی شبیه سازی مشاهده می شود که با افزایش خطا این نوسانات بیشتر می شود. برای نشان دادن دقت روش، نتایج مقایسه با شاخص های آماری در جدول (۳) آورده شده است. همان طور که در جدول (۳) مشاهده می شود شاخص آماری MAE، RMSE و MRE مقادیر کمی دارند که دقت خوب روش معکوس را نشان می دهد همچنین مقدار بالای  $R^2$  نشان دهنده تطابق خوب این دو روش می باشد و حتی این مقادیر هنگام اعمال خطا نیز نتایج خوبی را نشان می دهد که بیانگر این است که در صورت به وجود آمدن خطا، الگوی آلاینده به خوبی بازسازی می شود و نتایج بسیار قابل قبولی به دست می آید.

**مثال سوم: کاربرد طرح معکوس حافظ گروه در رودخانه با استفاده از سری زمانی.** با توجه به الگوی سری زمانی غلظت آلاینده (غلظت در مکان ابتدایی رودخانه و در تمام زمان ها) شکل (۶) و شبیه سازی مدل مستقیم، پروفیل مکانی در زمان انتهایی که

نشان‌دهنده تطابق خوب این دو روش می‌باشد. افزایش MAE، RMSE و MRE و کاهش  $R^2$  بر اثر افزایش خطا، کاهش دقت مدل بر اثر افزایش خطا اعمال‌شده بر شرط ابتدایی مدل معکوس را نشان می‌دهد.

روش، نتایج مقایسه با شاخص‌های آماری در جدول (۴) آورده شده است. همان‌طور که در جدول (۴) مشاهده می‌شود شاخص آماری MAE، RMSE و MRE مقادیر کمی دارند که دقت خوب روش معکوس را نشان می‌دهد همچنین مقدار بالای  $R^2$



شکل ۱۲ مقایسه طرح معکوس حافظ گروه با روش مستقیم بدون اعمال خطا

شکل ۱۳ مقایسه طرح معکوس حافظ گروه با روش مستقیم با اعمال خطا ۱۵٪

### نتیجه گیری

بر روی ورودی مدل معکوس انجام شد که در تمام حالات قله‌ها با دقت بسیار خوبی تشکیل شدند و نتایج شاخص‌های آماری دقت این روش را نشان داد. با توجه به این سه مثال دقت خوب طرح حافظ گروه در تشکیل تابع شدت آلاینده در رودخانه و بازسازی پروفیل مکانی قابل مشاهده است. این مدل همچنین امکان نشان دادن پروفیل مکانی غلظت در زمان‌های مختلف که کمک شایانی در مشاهده تحولات و تغییرات مکانی توزیع غلظت می‌کند را دارا است. این روش مشکلاتی همچون انتخاب و بهینه‌سازی ترم پایداری که به دلیل عددی بودن این روش است را ندارد که همین دلیل باعث بالا بردن سرعت و کم کردن خطای احتمالی می‌شود. علاوه بر موارد فوق یکی از مزیت‌های دیگر این روش، عدم نیاز به تهیه داده در تعداد بازه‌های کم در طول رودخانه می‌باشد که به دلیل دشوار بودن این کار یک مزیت مهم محسوب می‌شود. در نهایت به دلیل سرعت و دقت زیاد این مدل و ساده بودن محاسبات باعث صرفه‌جویی در زمان می‌شود. از محدودیت‌های این روش نیز می‌توان به عدم توانایی در بازسازی سری زمانی اشاره کرد.

در این پژوهش به منظور به دست آمدن شدت آلاینده، از حل عددی معادله انتقال آلودگی با ضرایب متغیر در رودخانه استفاده شد. سه مثال جهت ارزیابی این روش طراحی گردید که در مثال اول با استفاده از شرط اولیه (مثلث دو قله) دقت مدل مستقیم مورد ارزیابی قرار گرفت که نتایج به دست آمده نشان داد روش مستقیم تطابق بسیار زیادی با روش تمام ضمنی تفاضل محدود دارد. در مثال دوم به ازای شرط اولیه و با استفاده از روش مستقیم، پروفیل مکانی به دست آمد که به عنوان ورودی مدل معکوس استفاده شد. در این مثال نیز شبیه‌سازی با اعمال درصد خطاهای ۵، ۱۰ و ۱۵ درصد بر روی پروفیل مکانی صورت گرفت و نتایج حاصل نشان داد که قله‌ها به‌طور تقریباً کاملی تشکیل شدند که با توجه به از بین رفتن اثر دو قله، نشان از قدرت و توانایی مدل معکوس در تشکیل الگوی آلاینده می‌دهد. از خروجی مثال اول به عنوان ورودی مثال سوم استفاده شد که در این مثال با استفاده از طرح معکوس حافظ گروه بازسازی مدل برگشتی انجام گرفت. شبیه‌سازی صورت گرفته با اعمال درصد خطاهای ۵، ۱۰ و ۱۵

### مراجع

- [1] J. S. Gulliver, *Introduction to chemical transport in the environment*. Cambridge University Press, 2007.
- [2] S. C. Chapra, *Surface Water-Quality Modeling*, McGraw-Hill Publisher. New York, 1997.
- [3] M. Mazaheri, J. Mohammad Vali Samani, and H. M. V. Samani, "Mathematical Model for Pollution Source Identification in Rivers," *Environ. Forensics*, Vol. 16, pp. 310-321, 2015.
- [4] Nardo, A.D, Santonastaso, G.F., Battaglia, R. and Musmarra, D, "Smart identification system of surface water contamination by an innovative biosensor network," in *Conference: CEMEPE - 5th international conference on Environmental Management, Engineering, Planning and Economics*, (2015).
- [5] S. Zhang and X. Xin, "Pollutant source identification model for water pollution incidents in small straight rivers based on genetic algorithm," *Appl. Water Sci.*, vol. 7, no. 4, pp. 1955-1963, 2017.
- [6] M. G. (Kumar) and S. Mohamed, "Hybrid Genetic Algorithm—Local Search Methods for Solving Groundwater Source Identification Inverse Problems," *J. Water Resour. Plan. Manag.*, vol. 131, no. 1, pp. 45-57, Jan. 2005.
- [7] S. R. Mohan and D. Bithin, "Identification of Groundwater Pollution Sources Using GA-based Linked Simulation Optimization Model," *J. Hydrol. Eng.*, vol. 11, no. 2, pp. 101-109, Mar. 2006.
- [8] A. Ghane, M. Mazaheri, and J. Mohammad Vali Samani, "Location and release time identification of pollution point source in river networks based on the Backward Probability Method," *J. Environ. Manage.*, vol. 180, pp. 164-171, 2016.
- [9] W. P. Cheng and Y. Jia, "Identification of contaminant point source in surface waters based on backward location



- probability density function method,” *Adv. Water Resour.*, vol. 33, no. 4, pp. 397–410, Apr. 2010.
- [10] R. M. Neupauer and J. L. Wilson, “Backward probability model using multiple observations of contamination to identify groundwater contamination sources at the Massachusetts Military Reservation,” *Water Resour. Res.*, vol. 41, no. 2, pp. 1–14, Feb. 2005.
- [11] F. Cupola, M. G. Tanda, and A. Zanini, “Laboratory sandbox validation of pollutant source location methods,” *Stoch. Environ. Res. Risk Assess.*, vol. 29, no. 1, pp. 169–182, 2015.
- [12] J. Wang, J. Zhao, X. Lei, and H. Wang, “New approach for point pollution source identification in rivers based on the backward probability method,” *Environ. Pollut.*, vol. 241, pp. 759–774, Oct. 2018.
- [13] M. Loushabi, M. Mazaheri, and J. Mohammad Vali Samani, “Inverse Solution of the advection-dispersion equation in rivers for pollution source identification”, *Sharif J. Mech. Eng.*, vol. 35.3, no. 1, pp. 103–113, 2019. (In Persian)
- [14] E. Permanoon and M. Mazaheri, “Identify the source of pollution with an Inverse-time analytical solution to the pollution transport equation,” *Hydrophysics*, vol. 6, no. 2, pp. 25–39, 2021. (In Persian)
- [15] T. H. Skaggs and Z. J. Kabala, “Recovering the History of a Groundwater Contaminant Plume: Method of Quasi-Reversibility,” *Water Resour. Res.*, vol. 31, pp. 2669-2673, 1995.
- [16] T. Zhang, H. Li, and S. Wang, “Identification of particulate contaminant source locations in enclosed spaces with inverse CFD modelling,” in *12th International Conference on Indoor Air Quality and Climate 2011*, vol. 1, pp. 667–672, (2011).
- [17] R. M. Neupauer, B. Borchers, and J. L. Wilson, “Comparison of inverse methods for reconstructing the release history of a groundwater contamination source,” *Water Resour. Res.*, vol. 36, no. 9, pp. 2469–2475, 2000.
- [18] C. S. Liu, “Group preserving scheme for backward heat conduction problems,” *Int. J. Heat Mass Transf.*, vol. 47, no. 12–13, pp. 2567–2576, 2004.
- [19] C. S. Liu, C. W. Chang, and J. R. Chang, “The backward group preserving scheme for 1D backward in time advection-dispersion equation,” *Numer. Methods Partial Differ. Equ.*, vol. 26, no. 1, pp. 61–80, 2010.
- [20] C. W. Chang and C. C. Kuo, “A Lie-group approach for solving backward two-dimensional nonlinear Klein-Gordon equation,” *Procedia Eng.*, vol. 79, no. 1st ICM, pp. 590–598, 2014.
- [21] S. Abbasbandy and M. S. Hashemi, “Group preserving scheme for the Cauchy problem of the Laplace equation,” *Eng. Anal. Bound. Elem.*, vol. 35, no. 8, pp. 1003–1009, 2011.
- [22] W. Gao, M. Partohaghighi, H. M. Baskonus, and S. Ghavi, “Regarding the group preserving scheme and method of line to the numerical simulations of Klein–Gordon model,” *Results Phys.*, vol. 15, p. 102555, 2019.
- [23] C. W. Chang and C. S. Liu, “The backward group preserving scheme for multi-dimensional nonhomogeneous and nonlinear backward wave problems,” *Appl. Math. Model.*, vol. 38, no. 15–16, pp. 4027–4048, 2014.
- [24] Y. Chen, “International Journal of Heat and Mass Transfer High order implicit and explicit Lie-group schemes for solving backward heat conduction problems,” *Int. J. Heat Mass Transf.*, vol. 101, pp. 1016–1029, 2016.
- [25] R. Noori, B. Ghiasi, H. Sheikhan, and J. F. Adamowski, “Estimation of the Dispersion Coefficient in Natural Rivers Using a Granular Computing Model,” *J. Hydraul. Eng.*, vol. 143, no. 5, pp. 1–12, 2017.
- [26] M. Ramezani, R. Noori, F. Hooshyaripor, Z. Deng, and A. Sarang, “Numerical modelling-based comparison of

longitudinal dispersion coefficient formulas for solute transport in rivers,” *Hydrol. Sci. J.*, vol. 64, no. 7, pp. 808–819, 2019.

- [27] C. S. Liu, “Cone of non-linear dynamical system and group preserving schemes,” *Int. J. Non. Linear. Mech.*, vol. 36, no. 7, pp. 1047–1068, 2001.