



# QUAL2K:

A Modeling Framework for Simulating River and Stream  
Water Quality

## Documentation and Users Manual



The Mystic River at Medford, MA

**Steve Chapra and Greg Pelletier**

November 25, 2003

Chapra, S.C. and Pelletier, G.J. 2003. QUAL2K: A Modeling Framework for Simulating River and Stream Water Quality: Documentation and Users Manual. Civil and Environmental Engineering Dept., Tufts University, Medford, MA., [Steven.Chapra@tufts.edu](mailto:Steven.Chapra@tufts.edu)

## 1. GİRİŞ

QUAL2K (or Q2K) QUAL2E (or Q2E) modelinin gelişmiş versiyonunun gösterimini amaçlayan nehir yada akış (stream) su kalitesi modelidir. Q2K aşağıdaki yönlerden Q2E' ye benzer:

- Tek boyutlu. Kanal düşey ve yanal olarak çok iyi karışmıştır.
- Kararlı durum hidroliği. Devamlı akış üniform olmayan şekle benzetilir.
- Günlük ısı değişimi. Isı değişimi ve sıcaklık günlük zaman skalasında gösteriminde meteorolojinin görevi aynıdır.
- Günlük su kalitesi kinetikleri. Bütün su kalite türleri günlük zaman ölçeğine benzetilir.
- Isı ve kütle girdileri. Noktasal ve noktasal olmayan yükler ve sızıntılar aynı şekilde gösterilir.

QUAL2K modeli aşağıdaki yeni elementleri içerir:

- Software Environment ve Interface. Q2K Microsoft Windows programı içinde çalıştırılır. Q2K Windows Makro dilinde uygulama için Visual Basic (VBA) programlanır. Excel kullanıcıların birimleri grafiklendirmesi için kullanılır.
- Model bölümlenmesi. Q2E sistem aşamalarında alansal elementler eşit olarak oluşarak nehir içerisine ulaşır. Tersine, Q2K eşit olmayan alansal uzantılar kullanır. Ek olarak, çoğul yükler ve sızıntılar her gelişinde sisteme eklenebilir.
- Karbonlu BOD ayrışması. Q2K organik karbonu göstermede karbonlu BOD' un iki formunu kullanır. Bu formlar, düşük CBOD' dan yavaşça oksitler ve hızlı CBOD' dan hızlıca oksitler. Ek olarak, cansız organik partikül madde taklit ettirilir. Bu fosil (detrital) materyal uygun sitokiyometride fosforlu, nitrojen ve karbon partikülünden oluşur.
- Anoksik. Q2K oksijen seviyeleri sıfırın altındayken oksidasyon reaksiyonlarının azalmasıyla anoksik koşullar oluşur. Ek olarak, denitrifikasyon düşük oksijen konsantrasyonunda bildirilmeye başlanan ilk sıra reaksiyon olarak modellenir.
- Sediment – su etkileşimleri. Nutrientler ve çözünmüş oksijenin sediment su akışları içsel olarak yapılır. Bu, oksijen (SOD) ve nutrient akışları sediman içindeki reaksiyonlar, yüzeysel sulardaki çözünmüş oksijen konsantrasyonu ve organik partikül madde yerleşiminin işlevsel olarak benzeridir.
- Dip alg. Model yapışık dip alge açık bir şekilde benzer.
- Düşük yoğunluk. Düşük yoğunluk inorganik katılar, organik madde ve algin işlevi olarak hesaplanır.
- pH. Alkalinite ve toplam inorganik karbon Q2E dekine benzer . Daha sonra nehrin pH ı bu iki niteliğe dayandırılarak diğer modele benzetilir.
- Patojenler. Genel patojenler diğer modelle aynıdır. Patojen oluşumunu ışık, yerleşim ve sıcaklığın işlevi belirler.

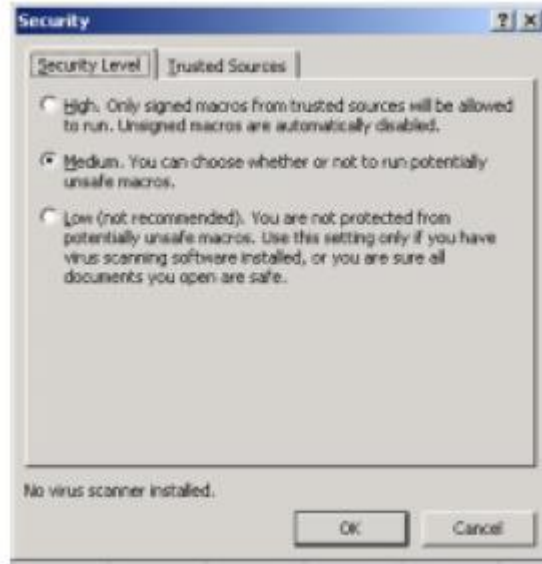
## MODELİN ÇALIŞTIRILMASI

Birçok su kalitesi modeli donanım gerektirir. QUAL2K için böyle bir durum yoktur. Çünkü model Excel Workbook olarak düzenlenmiştir. Program Excel in makro dili içinde yazılır: uygulamalar için Visual Basic yada VBA. Excel Workbook'un kutucukları ve grafikler sonuç çıkarma ve veri girişinde kullanılır. Bu nedenle, modeli başlatmak için Workbook' u açmamız yeterlidir. Devamında başlangıç modelini çalıştırman için vereceğin talimatların nasıl olacağını adım adım önerir.

**Step 1:** Veri dosyaları ve Workbook' u saklayacak QUAL2K isimli bir dosya oluřtur. Örneęin, devamındaki örnekte, QUAL2K isimli bir dosyayı C sürücüsünde oluřtur.

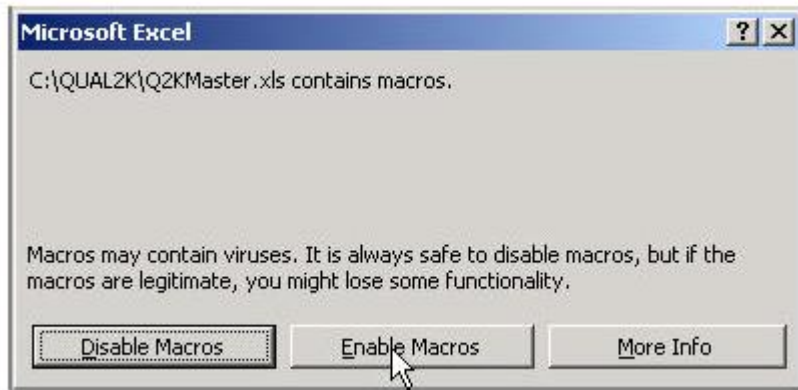
**Step 2:** CD inden C:\ QUAL2K ya asıl Q2K dosyasını (Q2KMaster.xls) kopyala

**Step 3:** Excel aç ve yüksek güvenlik seviyesine olduęundan emin olduktan sonra ikinci aşamaya geç (Şekil 1). Bunu mönüdeki yönlendirmeleri kullanarak yapabilirsin. Tools → Macro → Security. Medium butonunda olduęundan emin ol ve seç.



Şekil 1. Excel Makro Güvenlik Seviyesi Diyalog Kutusu. Q2K yı çalıştırmak için Medium güvenlik seviyesini seçmelisin.

**Step 4:** Q2KMaster.xls aç. Bunu makro güvenlik diyalogu gösterileceęi zaman yap (Şekil 2)



Şekil 2. Excel Makro güvenlik diyalog kutusu. Q2K çalıştırmak için Enable Macros butonunu seçmelisin.

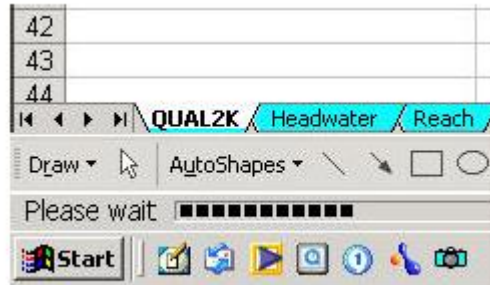
**Step 5:** Hemen Q2K.xls olarak dosyayı sakla. Bu rutin temelde kullanacağın Excel Workbook olacaktır. Bazı sebeplerle Q2K.xls yi kullanılamaz şekilde modifiye edersen, yardım için Q2KMaster.xls' ye her zaman geri dönebilirsin.

**Step 6:** QUAL2K dökümünde, 10. hücreye git ve veri dosyaları yönetimindeki yola gir: C:\QUAL2K\ Veri dosyaları (Şekil 3)

	A	B	C	D	E	F
1	<b>QUAL2K</b>					
2	<b>Stream Water Quality Model</b>					
3	<b>Steve Chapra and Greg Pelletier</b>					
4						
5						
6						
7	System ID:					
8	River name	Boulder Creek				Open Old File
9	Saved file name	BC092187				
10	Directory where file saved	C:\QUAL2K\DataFiles				Run
11	Month	9				
12	Day	21				
13	Year	1987				
14	Time zone	Mountain				
15	Daylight savings time	Yes				
16	Calculation:					
17	Calculation step	0.25 hours				
18	Final time	3 day				
19	Program determined calc step	0.187500 hours				
20	Time of last calculation	0.37 minutes				
21	Time of sunrise	6:46 AM				
22	Time of solar noon	12:53 PM				
23	Time of sunset	6:59 PM				
24	Photoperiod	12.22 hours				

Şekil 3. 10. hücre içine dosya girişinin gösterildiği QUAL2K dökümü

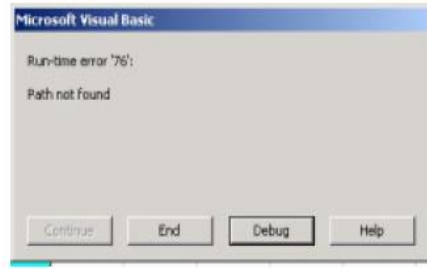
**Step 7:** Çalışma butonuna tıkla. QUAL2K uygulamaya başlayacak. Dökümün sol alt köşesinde gösterildiği gibi durum çubuklarında uygulama çubuklarını takip et (Şekil 4).



Şekil 4. QUAL2K durum çubukları dökümün sol alt köşesinde yer alır.

Program tam olarak çalışırsa, gösterge (temperature plot) çalışıyor olacak. Tam olarak çalışmazsa, 2 olasılık çıkar:

1. Microsoft Office' nin eski versiyonunu kullanıyor olabilirsin. Excel çoğu eski versiyonla uyuşabilmesine rağmen Q2K bunlarla çalışmayacaktır.
2. Önceki aşamaları uygularken hata yapmış olabilirsin. Yaygın hata B10 hücresine girdiğinde dosyanın rotasını karıştırmaktır. Böyle bir durum varsa bir hata mesajı alacaksın (Şekil 5).



Şekil 5. QUAL2K dökümünde 10. hücrede dosya türün yanlışsa bir hata mesajı çıkacaktır.

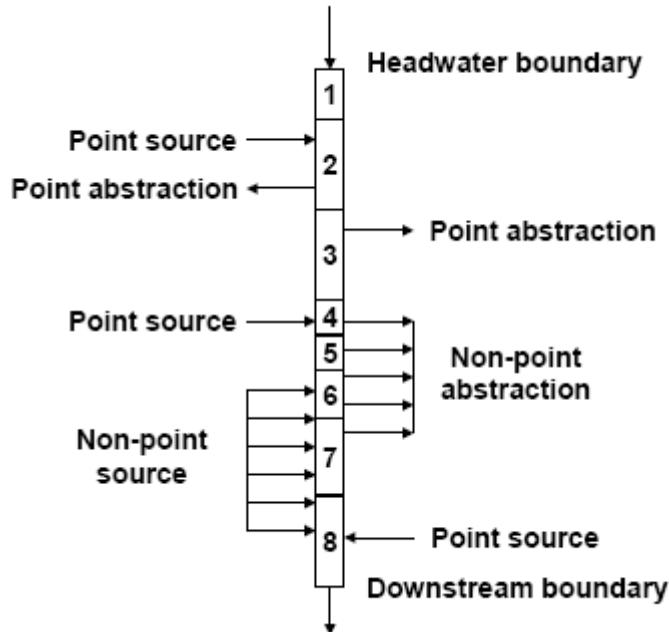
Böyle olursa sonlama butonuna tıkla. Bu işlem çalışmayı sonlandıracak ve Excel Workbook' a seni geri götürecektir. Daha sonra QUAL2K dökümüne geri dönmeli ve dosya girişlerini düzeltmelisin. Eğer üstte açıkça belirtildiği gibi doğru isimler ile talimatlarını düzenlemediysen aynı uyarı notu tekrar çıkacaktır.

**Step 8:** QUAL2K dökümü üzerinde açık olan eski dosya butonunu tıkla. Kitap sayfasına talimatın ulaşacaktır: C:\ QUAL2K\ Veri dosyaları. Oluşmakta olan yeni bir dosya (BC092187.q2k) görmelisin. Q2K' ya geri dönmek için iptal butonuna tıklat.

Not: Q2K her çalıştığında, QUAL2K dökümü üzerindeki B9 hücresinde açıkça belirtilen dosya adı ile veri dosyası oluşturulacaktır (Şekil 3). Program otomatik olarak aynı isimle ilave.q2k ekler. Daha sonra, bu dosya üst yazısı olacak, yeni bir uygulama başlattığında dosya adını değiştirmek için kesinlik sağlar.

### 3. SEGMENTASYON VE HİDROLİK BİLİMİ

Model, Şekil 6' da gösterildiği, gibi nehrin ana akışını güncel olarak takip eder. Kollar belirgin olarak modellenmemiştir, fakat noktasal kaynaklar gibi gösterilebilir.

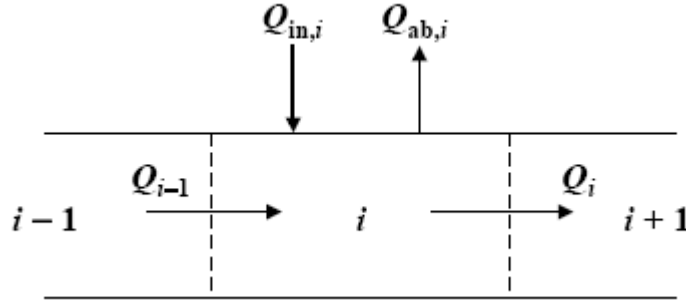


Şekil 6. QUAL2K segmentasyon planı

### 3.1. Akış Yüğü

Sürekli durum akış dengesi her model uzanımı için yerine getirilir (Şekil 7).

$$Q_i = Q_{i-1} + Q_{in,i} - Q_{ab,i} \quad (1)$$



Şekil 7. Reach flow balance (Akış dengesi)

$Q_i$  = i bölgesinden i+1 bölgesine dış akış [ $m^3/d$ ]

$Q_{i-1}$  = i-1 bölgesinden akış yukarı iç akış [ $m^3/d$ ]

$Q_{in,i}$  = Noktasal ve noktasal olmayan kaynaklardan toplam iç akış [ $m^3/d$ ]

$Q_{ab,i}$  = Noktasal ve noktasal olmayan sızıntılardan dolayı toplam dış akış [ $m^3/d$ ]

Kaynaklardan toplam iç akış aşağıdaki gibi hesaplanır

$$Q_{in,i} = \sum_{j=1}^{psi} Q_{ps,i,j} + \sum_{j=1}^{npsi} Q_{nps,i,j} \quad (2)$$

$Q_{ps,i,j}$  = i ye ulaşacak iç akış jth noktasal kaynak [ $m^3/d$ ]

$psi$  = i ye ulaşacak noktasal kaynakların toplam sayısı

$Q_{nps,i,j}$  = i ye ulaşacak iç akış jth noktasal olmayan kaynak [ $m^3/d$ ]

$npsi$  = i ye ulaşacak noktasal olmayan iç akış kaynakların toplam sayısı

Sızıntılardan toplam dış akış aşağıdaki gibi hesaplanır

$$Q_{ab,i} = \sum_{j=1}^{pai} Q_{pa,i,j} + \sum_{j=1}^{npai} Q_{npa,i,j} \quad (3)$$

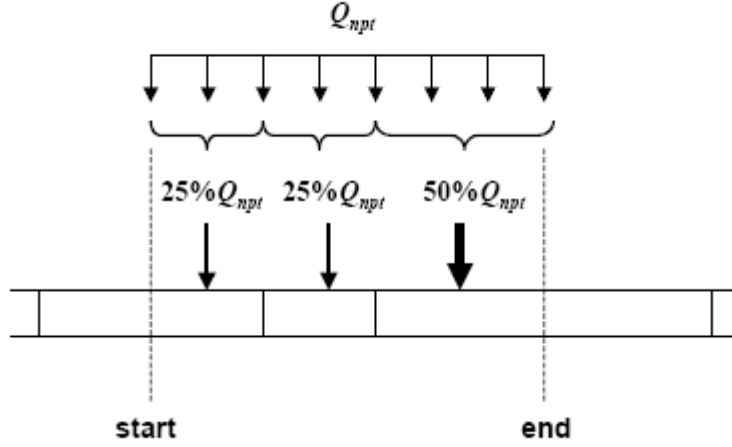
$Q_{pa,i,j}$  = reach i' den çıkan dış akış jth noktasal sızıntı [ $m^3/d$ ]

$pai$  = reach i' den noktasal sızıntıların toplam sayısı

$Q_{npa,i,j}$  = reach i' den çıkan dış akış jth noktasal olmayan sızıntı [ $m^3/d$ ]

$npai$  = reach i' den noktasal olmayan sızıntıların toplam sayısı

Noktasal olmayan kaynaklar ve sızıntılar çizgi kaynaklar gibi modellenir. Şekil 8'deki gibi, noktasal olmayan kaynak yada sızıntı bunların başladığı noktanın başlangıç ve bitiş kilometresince sınırları belirlenir. Akım uzunluk boyunca ya direk bütüne yada her bir reach'e dağıtılır.



Şekil 8. Noktasal olmayan kaynaktan akışın reach'e dağıtılması

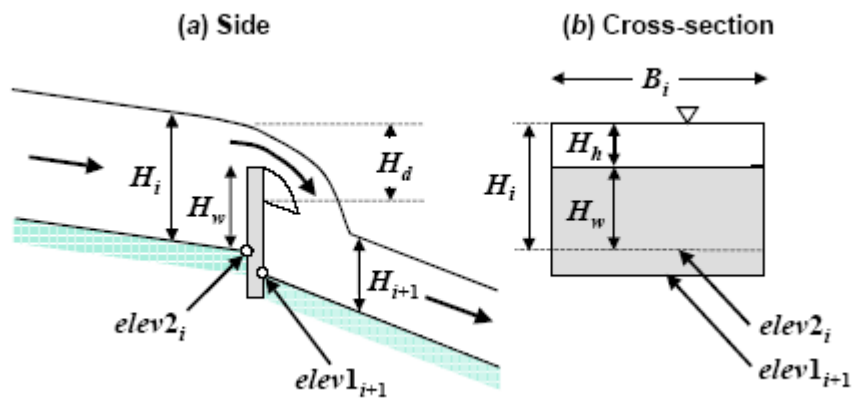
### 3.2. Hidrolik Özellik

Her reach için dış akış hesaplandığında, derinlik ve hız üç yöntemden birisi ile (su bentleri -weirs-, eğim oranları ve Manning denklemleri) hesaplanır. Program aşağıdaki biçimde bu seçenekler arasında karar verir:

- Su bendi yüksekliği girilirse, bent tercihi uygulanır.
- Su bendi yüksekliği sıfır alınır ve pürüzsüzlük katsayısı(n) girilirse, Manning eşitlik seçeneği uygulanır.
- İlk şartların hiçbirisiyle karşılaşılmazsa, Q2K eğim oralarını kullanır.

#### 3.2.1. Su bentleri

Şekil 9 da Q2K modelinde su bentlerinin nasıl gösterildiğini görebiliriz. Semboller aşağıdaki gibi tanımlanır:



Şekil 9. Keskin uçlu su bendi

- $H_i$  = Su bendinin akıntıya karşı reach' den derinliği (m)  
 $H_{i+1}$  = Su bendinin akıntı aşağı reach' den derinliği (m)  
 $elev2_i$  = Akıntıya karşı reach' in deniz seviyesi üzerinde yükselmesi (m)  
 $elev1_{i+1}$  = Akıntı aşağı reach' in deniz seviyesi üzerinde yükselmesi (m)

$H_w$  = elev<sub>2i</sub> üzerinde su bendinin yüksekliği (m)

$H_d$  = reach i+1 ve reach i' nin ara yüzeyinde deniz seviyesi üstünde yükseklik alçalması (m)

$H_h$  = Su bendi üzerindeki yükseklik (m)

$B_i$  = reach i' nin genişliği (m)

$H_h/H_w < 0,4$  olduğunda keskin uçlu su bendi için, akış kaynak tarafıyla ilişkilidir (Finnemore and Franzini 2002)

$$Q_i = 1.83 B_i H_h^{3/2} \quad (4)$$

$Q_i$  = m<sup>3</sup>/sn'de su bendinin akıntıya karşı olan kesiminden dışa akıştır.

$B_i$  ve  $H_h$  = m

4 nolu eşitliğin çözülebilmesi için;

$$H_h = \left( \frac{Q_i}{1.83 B_i} \right)^{2/3} \quad (5)$$

Bu sonuç daha sonra reach i'nin derinliğini ve su bendi üzerindeki alçalmayı hesaplamak için kullanılabilir.

$$H_i = H_w + H_h \quad (6)$$

$$H_d = \text{elev}_{2i} + H_i - \text{elev}_{1i+1} - H_{i+1} \quad (7)$$

Reach i'nin bölgesel alanı ve hızı daha sonra aşağıdaki gibi bulunabilir

$$A_{c,i} = B_i H_i \quad (8)$$

$$U_i = \frac{Q_i}{A_{c,i}} \quad (9)$$

### 3.2.2. Eğim oranları

Akıştaki hız ve derinliğin anlamıyla ilgili güçlü eşitlikler kullanılabilir,

$$U = a Q^b \quad (10)$$

$$H = \alpha Q^\beta \quad (11)$$

Burada; a, b,  $\alpha$ ,  $\beta$  sırasıyla hız azalımı ve eğim oranları azalım aşamasını (stage-discharge) belirlemek için ampirik katsayılarıdır. Hız ve derinlik değerleri daha sonra genişlik ve karşı bölgesel alanı belirlemek için kullanılabilir.

$$A_c = \frac{Q}{U} \quad (12)$$

$$B = \frac{A_c}{H} \quad (13)$$

b ve  $\beta$  exponent değerleri tipik olarak Tablo 1' de verilmiştir. Not: b ve  $\beta$ ' nin toplamı 1'e eşit veya daha küçük olmalıdır. Eğer toplam 1'e eşitse, kanal dikdörtgen biçimindedir.



**Tablo 1.** Akışın hız ve derinliğini belirlemek için kullanılan eğim oranlarının üsleri (exponent) için tipik değerler (Barnwell et al. 1989).

Equation	Exponent	Typical value	Range
$U = aQ^b$	$b$	0.43	0.4–0.6
$H = \alpha Q^\beta$	$\beta$	0.45	0.3–0.5

### 3.2.3. Manning Denklemi

Her reach trapez kanal olarak ideal görünür (Şekil 10). Sabit akım şartları altında, Manning eşitliği derinlik ve akış arasındaki ilişkiyi izlemek için aşağıdaki gibi kullanılabilir

$$Q = \frac{S_0^{1/2}}{n} \frac{A_c^{5/3}}{P^{2/3}} \quad (14)$$

Burada;

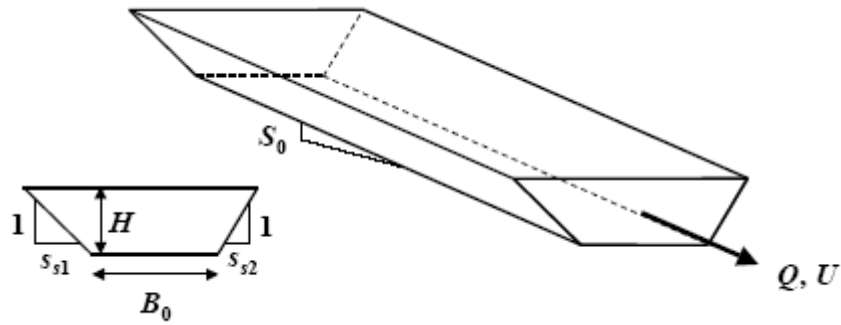
$Q$  = Akış ( $m^3/sn$ )

$S_0$  = Taban eğimi ( $m/m$ )

$P$  = Islak alan ( $m$ )

$n$  = Manning pürüzsüzlük katsayısı

$A_c$  = Karşı bölgesel alan ( $m^2$ )



Şekil 10. Trapez (Trapezoidal) Kanal

Trapez kanalın karşısındaki kanal aşağıdaki gibi hesaplanır:

$$A_c = [B_0 + 0.5(s_{s1} + s_{s2})H]H \quad (15)$$

$B_0$  = Taban genişliği ( $m$ )

$s_{s1}$  ve  $s_{s2}$  = Şekil 10' da gösterildiği gibi iki yanal eğim ( $m/m$ )

$H$  = reach derinliği ( $m$ )

Islak alan aşağıdaki gibi hesaplanır:

$$P = B_0 + H\sqrt{s_{s1}^2 + 1} + H\sqrt{s_{s2}^2 + 1} \quad (16)$$

15 ve 16 nolu eşitlikler 14 numaralı eşitlikte yerine konulduktan sonra derinliği bulmak için tekrar çözülebilir.

$$H_{k+1} = \frac{(Qn)^{3/5} \left( B_0 + H\sqrt{s_{s1}^2 + 1} + H\sqrt{s_{s2}^2 + 1} \right)^{2/5}}{S^{3/10} [B_0 + 0.5(s_{s1} + s_{s2})H]} \quad (17)$$

Burada;

$k = 0, 1, 2, \dots, n$ ,  $n$  = tekrar sayısı. Belirtilen değer % 0,001' in altına düşerse hesap hatalı olduğundan model sonlandırılır. Hata değeri aşağıdaki gibi hesaplanır:

$$\varepsilon_a = \left| \frac{H_{k+1} - H_k}{H_{k+1}} \right| \times 100\% \quad (18)$$

15 nolu eşitlik ile karşı bölgesel alan belirlenebilir ve daha sonra hız süreklilik eşitliğinden tanımlanabilir,

$$U = \frac{Q}{A_c} \quad (19)$$

Ortalama reach genişliği,  $B$  (m), aşağıdaki gibi hesaplanır:

$$B = \frac{A_c}{H} \quad (20)$$

Manning katsayısı için önerilen değerler tablo 2'de listelenmiştir.

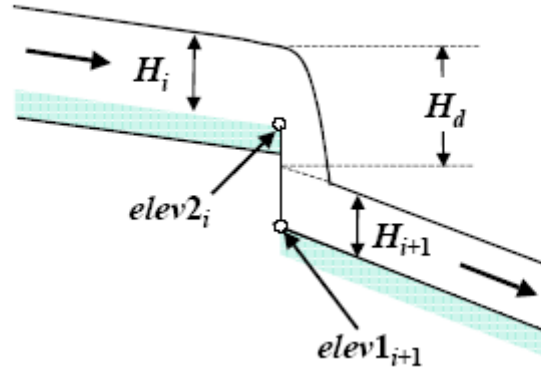
**Tablo 2.** Çeşitli açık kanal yüzeyleri için Manning pürüzsüzlük katsayısı

MATERIAL	$n$
<b>Man-made channels</b>	
Concrete	0.012
Gravel bottom with sides:	
concrete	0.020
mortared stone	0.023
riprap	0.033
<b>Natural stream channels</b>	
Clean, straight	0.025-0.04
Clean, winding and some weeds	0.03-0.05
Weeds and pools, winding	0.05
Mountain streams with boulders	0.04-0.10
Heavy brush, timber	0.05-0.20

Manning pürüzsüzlük katsayısı  $n$  tipik olarak akış ve derinlik ile değişir. Düşük akımda derinlik azaldığı için ona bağlı olarak pürüzsüzlük artar. Pürüzlü doğal kanallar için yaklaşık 0,15 düz kanallar için yaklaşık 0,015 arasında değişen Manning's  $n$  değişik yayınlanmış değerleri bankfull kapasitede akış koşullarını temsil eder. Su kalitesi değerlendirmesi için kritik derinlik koşulları genel olarak bankfull derinlikten çok daha azdır ve de pürüzsüzlük göreceli olarak çok daha yüksek olabilir.

### 3.2.4. Şelaleler (Waterfalls)

Bölüm 3.2.1'de su bendinin üzerindeki suyun alçalması hesaplanmıştı. Böyle durumlarda ortaya çıkan tekrar havalandırma artışını hesaplamak için bu değere ihtiyaç duyulur. Ek olarak, su bentlerindeki böyle düşüşler şelalelerde de ortaya çıkabilir (Şekil 11).



Şekil 11. Şelaleler

İki reach arasındaki sınırda ani olarak deniz seviyesi üstündeki yükselme düştüğünde böyle durumdaki düşüşleri QUAL2K hesaplar. Eğim oranı ve Manning eşitliği seçeneğinin her ikisinde de bu amaç için model 7 nolu eşitliği kullanır. Şu husus fark edilmiş olmalıdır. Reach'in aşağı yönlü akış (downstream) sonunda deniz seviyesi üstüne yükselmesi reach'in bir sonraki aşağı akışın başlangıcından daha büyük olduğunda düşüm ancak hesaplanabilir. Bu  $elev2_i > elev1_{i+1}$  olması durumudur.

### 3.3. Dolaşım Zamanı

Her reach'in kalış zamanı aşağıdaki gibi hesaplanabilir:

$$\tau_k = \frac{V_k}{Q_k} \quad (21)$$

Burada;

$\tau_k$  = k<sup>th</sup> reach'in kalış süresi (d)

$V_k$  = k<sup>th</sup> reach'in hacmi (m<sup>3</sup>) =  $A_{c,k} \Delta x_k$ , ve  $\Delta x_k$  = k<sup>th</sup> reach'in uzunluğu (m).

Reach i'nin yukarı akıştan aşağı akışın sonuna kadar dolaşım zamanını belirlemesi için daha sonra tüm zamanlar toplanır.

$$t_{t,i} = \sum_{k=1}^i \tau_k \quad (22)$$

Burada;  $t_{t,i}$  = Dolaşım zamanı (d)

### 3.4. Boyuna Dispersiyon

İki reach arasındaki sınırda boyuna dispersiyonu belirlemek için iki seçenek vardır. İlkinde, kullanıcı hesaplanan değerleri basitçe girebilir. Kullanıcı değerleri girmezse, temel hidrolik formülü kanalın hidroliğine dayanan dispersiyonu içsel olarak çözmek için kullanılır.

$$E_{p,i} = 0.011 \frac{U_i^2 B_i^2}{H_i U_i^*} \quad (23)$$

Burada;

$E_{p,i}$  = i ve i+1 reach'leri arasındaki boyuna dispersiyon ( $m^2/s$ )

$U_i$  = Hız ( $m/sn$ )

$B_i$  = Genişlik ( $m$ )

$H_i$  = Ortalama derinlik ( $m$ )

$U_i^*$  = Hız azalması ( $m/sn$ ), bu daha çok karakteristik işlev ile ilişkilidir.

$$U_i^* = \sqrt{gH_iS_i} \quad (24)$$

$g$  = Yerçekimi ivmesi ( $= 9,81 m/sn^2$ )

$S$  = Kanal eğimi (boyutsuz)

$E_{p,i}$ , şartlar belirlendikten yada hesaplandıktan sonra sayısal dispersiyon aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$E_{n,i} = \frac{U_i \Delta x_i}{2} \quad (25)$$

Dispersiyon modeli  $E_i$  (i.e., model hesaplamalarında kullanılan değer) daha sonra aşağıdaki gibi devam eder.

- $E_{n,i} \leq E_{p,i}$  ise, dispersiyon modeli,  $E_i$  is set to  $E_{p,i} - E_{n,i}$ .
- $E_{n,i} > E_{p,i}$  ise, dispersiyon modeli sıfırda gerçekleşir.

Sonraki durum için, dispersiyon sonucu fiziksel dispersiyondan daha büyük olacaktır. Böylece dispersive karışım gerçekten daha yüksek olacaktır. Fark edilmelidir ki, çoğu sabit durumlu nehir için konsantrasyon meyillerinde bu değer artışının etkisi önemsiz olacaktır. Eğer fark/artış önemliyse, tek alternatif, sayısal dispersiyonun fiziksel dispersiyondan daha küçük olması için daha küçük mesafelere reach'leri ayırmaktır.

## 5. MODELİ OLUŞTURAN BİLEŞENLER

### 5.1. Bileşenler ve Genel Kütle Dengesi

**Tablo 5.** Model Aşama Bileşenleri

Değişken	Sembol	Birimler
İletkenlik	s	$\mu mhos$
İnorganik süspanse katılar	$m_i$	$mgD/L$
Çözünmüş oksijen	o	$mgO_2/L$
Yavaş CBOD tepkisi	$c_s$	$mgO_2/L$
Hızlı CBOD tepkisi	$c_f$	$mgO_2/L$
Çözünmüş organik nitrojen	$n_o$	$\mu gN/L$
Amonyak nitrojen	$n_a$	$\mu gN/L$
Nitrojen nitrat	$n_n$	$\mu gN/L$
Çözünmüş organik fosfor	$p_o$	$\mu gP/L$
İnorganik fosfor	$p_i$	$\mu gP/L$
Fitoplankton	$a_p$	$\mu gA/L$
Detritus	$m_o$	$mgD/L$
Patojen	x	$cfu/100 ml$
Alkalinite	Alk	$mgCaCO_3/L$
Toplam inorganik karbon	$c_T$	$mole/L$
Dip alg	$a_b$	$gD/m^2$

Model bileşenleri Tablo 5' de listelenmiştir. \*mg/L  $\equiv$  g/m<sup>3</sup>

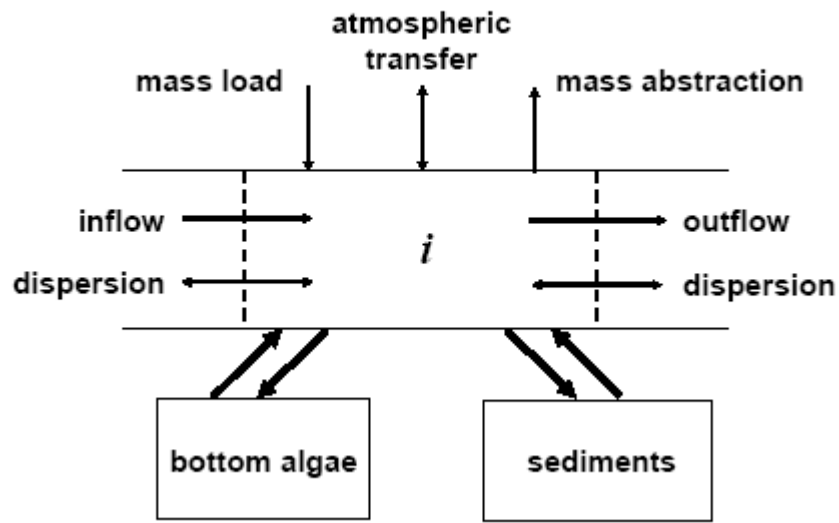
Hepsi için fakat dip alg hariç, bir reach' deki genel kütle dengesi aşağıdaki gibi yazılır (Şekil 15).

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{Q_{i-1}}{V_i} c_{i-1} - \frac{Q_i}{V_i} c_i - \frac{Q_{ab,i}}{V_i} c_i + \frac{E'_{i-1}}{V_i} (c_{i-1} - c_i) + \frac{E'_i}{V_i} (c_{i+1} - c_i) + \frac{W_i}{V_i} + S_i \quad (55)$$

Burada;

$W_i$  = reach i'ye bileşenlerin aşırı yüklenmesi [g/d yada mg/d]

$S_i$  = Reaksiyonlardan dolayı kaynaklar ve bileşenlerin azalması ve kütle transfer mekanizması [g/m<sup>3</sup>/d yada mg/m<sup>3</sup>/d]



Şekil 15. Kütle dengesi

Dıştan gelen yük aşağıdaki gibi hesaplanır;

$$W_i = \sum_{j=1}^{psi} Q_{ps,i,j} c_{ps,i,j} + \sum_{j=1}^{npsi} Q_{nps,i,j} c_{nps,i,j} \quad (56)$$

Burada;

$c_{ps,i,j}$  = reach i için jth noktasal kaynak konsantrasyonu [mg/L yada  $\mu$ g/L]

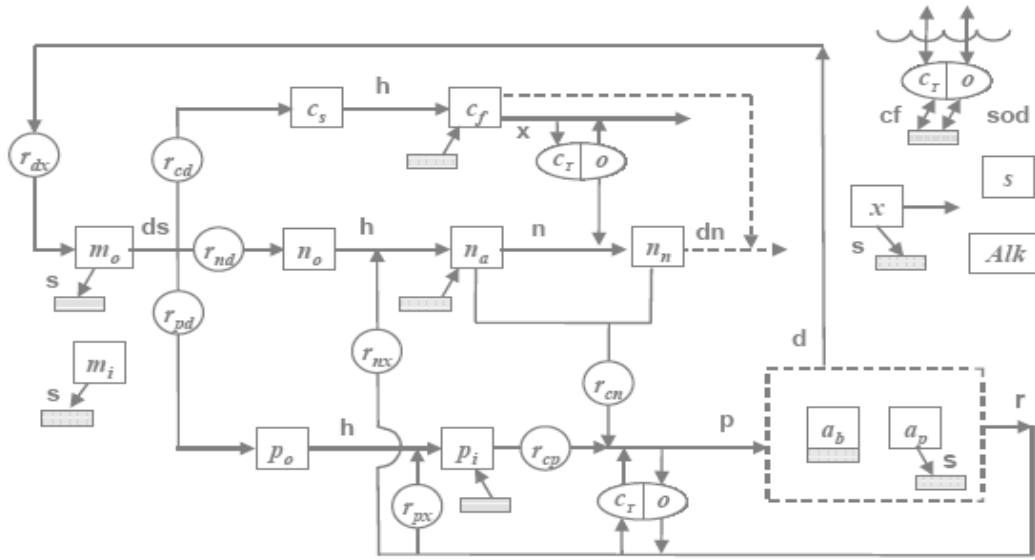
$c_{nps,i,j}$  = reach i için jth noktasal olmayan kaynak konsantrasyonu [mg/L yada  $\mu$ g/L]

Dip alg için, taşınım ve yük birimleri ihmal edilir.

$$\frac{da_{b,i}}{dt} = S_{b,i} \quad (57)$$

Burada;  $S_{b,i}$  = Reaksiyonlardan dolayı kaynaklar ve dip algin azalması [gD/m<sup>2</sup>/d].

Kaynaklar ve durum değişkenlerinin azalması şekil 16' da gösterilir. Devamındaki bölümlerde prosesin matematiksel gösterimi verilir.



Şekil 16. Model kinetikleri ve kütle transfer prosesleri. Durum değişkenleri tablo 5’ de tanımlanır. Bozulma (ds), hidroliz (h), oksidasyon (x), nitrifikasyon (n), denitrifikasyon (dn), fotosentez (p), ölüm (d), respirasyon (r) kinetik proseslerdir. Tekrar havalandırma (re), yerleşim (s), sedimen oksijen ihtiyacı (SOD), sedimen inorganik karbon değişimi (cf) kütle transfer prosesleridir. Not: stokiyometrik dönüşümler için subscript x sırasıyla klorofil a (a), fitoplanktonun kuru ağırlığı (d) ve dip algı temsil eder.

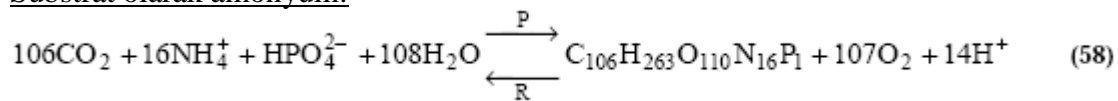
## 5.2. Reaksiyon Esasları

### 5.2.1. Biyokimyasal reaksiyonlar

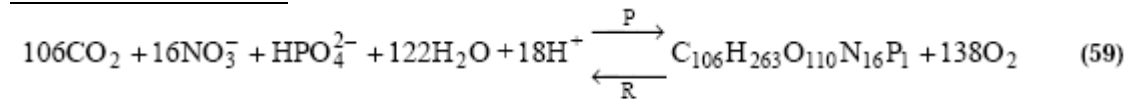
Modelde yer alan önemli biyokimyasal reaksiyonları göstermek için aşağıdaki kimyasal eşitlikler kullanılır (Stumm ve Morgan 1996):

#### Bitki fotosentezi ve solunum:

Substrat olarak amonyum:



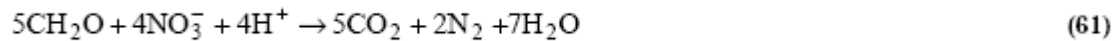
Substrat olarak nitrat:



#### Nitrifikasyon:



#### Denitrifikasyon:



Not: Amonyak birleşimi ve pH simülasyonunun karıştığı bu gibi modellerde ilave reaksiyonlar kullanılır. Bu gelecek bölümlerde daha sonra tartışılacak başlıklarda özetlenecektir.

### 5.2.2. Organik maddenin sitokiyometrisi

Model organik madde sitokiyometrisinin (bitkiler ve detritus) kullanıcı tarafından açıkça belirtilmesini gerektirir. Aşağıdaki yaklaşım ilk tahin olarak önerilir.

$$100 \text{ gD} : 40 \text{ gC} : 7200 \text{ mgN} : 1000 \text{ mgP} : 1000 \text{ mgA} \quad (62)$$

Burada;

$\text{gX}$  = X elementinin kütlesi (g) ve  $\text{mgY}$  = Y elementinin kütlesi (mg)  
D, C, N, P ve A sırasıyla kuru ağırlık, karbon, nitrojen, fosfor ve klorofil a' yı temsil eder. Klorofil a yaklaşık olarak 500-2000 mgA arasında değerlerinin çok değişken olduğu fark edilmelidir.

Bu değerler daha sonra stokiyometrik oranları belirlemek için aşağıdaki gibi birleştirilir.

$$r_{xy} = \frac{\text{gX}}{\text{gY}} \quad (63)$$

Örneğin, detritus'un 1gD si çözüldüğünde salınan nitrojen miktarı aşağıdaki gibi hesaplanabilir.

$$r_{nd} = \frac{7200 \text{ mgN}}{100 \text{ gD}} = 72 \frac{\text{mgN}}{\text{gD}}$$

#### 5.2.2.1. Oksijen üretimi ve tüketimi

Modelde tavsiye edilen oksijen üretim ve tüketim hızlarının kullanılması gerekir. Substrat amonyaksa, bitki maddesinin her gramı için fotosentez yoluyla üretilen oksijenin gramını belirlemek için aşağıdaki oran (eşitlik 62'yi esas alan) kullanılabilir.

$$r_{oca} = \frac{107 \text{ moleO}_2 (32 \text{ gO}_2/\text{moleO}_2)}{106 \text{ moleC} (12 \text{ gC}/\text{moleC})} = 2.69 \frac{\text{gO}_2}{\text{gC}} \quad (64)$$

Substrat nitratsa, 63 nolu eşitliği temel alan aşağıdaki oran uygulanır.

$$r_{ocn} = \frac{138 \text{ moleO}_2 (32 \text{ gO}_2/\text{moleO}_2)}{106 \text{ moleC} (12 \text{ gC}/\text{moleC})} = 3.47 \frac{\text{gO}_2}{\text{gC}} \quad (65)$$

Not: Hızlı organik oksidasyon CBOD ve bitkisel solunumun her ikisi için tüketilen oksijenin sitokiyometrik miktarını bulmak için 68 nolu eşitlik de kullanılır.

Nitrifikasyon için 64 nolu eşitlik esas alınarak aşağıdaki oran kullanılır.

$$r_{on} = \frac{2 \text{ moleO}_2 (32 \text{ gO}_2/\text{moleO}_2)}{1 \text{ moleN} (14 \text{ gN}/\text{moleN})} = 4.57 \frac{\text{gO}_2}{\text{gN}} \quad (66)$$

### 5.2.2.2. Denitrifikasyondan ötürü CBOD kullanımı

60 numaralı eşitlikte gösterildiği şekilde denitrifikasyon süresince CBOD kullanılır.

$$r_{ondn} = 2.67 \frac{\text{gO}_2}{\text{gC}} \frac{5 \text{ moleC} \times 12 \text{ gC/moleC}}{4 \text{ moleN} \times 14 \text{ gN/moleN}} \times \frac{1 \text{ gN}}{1000 \text{ mgN}} = 0.00286 \frac{\text{gO}_2}{\text{mgN}} \quad (67)$$

### 5.2.3. Sıcaklığın Reaksiyon Üzerine Etkisi

Modelde kullanılan bütün ilk sıra reaksiyonlar için sıcaklığın etkisi aşağıda gösterilmiştir.

$$k(T) = k(20)\theta^{T-20} \quad (68)$$

Burada;  $k(T)$  = T°C sıcaklıkta reaksiyon hız sabiti

$\Theta$  = Reaksiyon için sıcaklık katsayısı

## 5.3. Reaksiyon Bileşenleri

Model durum değişkenlerinin konsantrasyonları ve özel reaksiyonları tanımlayan matematiksel ilişkiler (Tablo 5) sonraki paragraflarında gösterilir.

### 5.3.1. Konversatif (Conservative) Maddeler (s)

Tanıma göre, konversatif maddeler reaksiyonlara girmez.

$$S_i = 0 \quad (69)$$

### 5.3.2. Fitaplankton

Fotosentezden dolayı fitaplankton artar. Solunum, ölüm ve çoğalma yoluyla azalır.

$$S_{ap} = \text{PhytoPhoto} - \text{PhytoResp} - \text{PhytoDeath} - \text{PhytoSettl} \quad (70)$$

#### 5.3.2.1. Fotosentez

Fitaplankton fotosentezi sıcaklık, besin ve sıcaklığın işlevidir.

$$\text{PhytoPhoto} = \mu_p a_p \quad (71)$$

Burada;  $\mu_p$  = Fitaplankton fotosentezi hız sabiti [1/d] dir. Aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$\mu_p = k_{gp}(T) \phi_{Np} \phi_{Lp} \quad (72)$$

Burada;  $k_{gp}(T)$  = T°C sıcaklıkta max. fotosentez hızı [1/d]

$\phi_{Np}$  = Fitaplankton nutrient devir faktör [0 ve 1 arasında boyutsuz sayı]

$\phi_{Lp}$  = Fitaplankton ışık devir katsayısı [0 ve 1 arasında boyutsuz sayı]

**Nutrient Sınırı.** İnorganik nitrojen ve fosfor için büyüme sınırını göstermede Michaelis-Menten eşitlikleri kullanılır. Minimum değer daha sonra nutrient devir faktörünü hesaplamak için kullanılır.

$$\phi_{Np} = \min \left( \frac{n_a + n_n}{k_{sNp} + n_a + n_n}, \frac{P_i}{k_{sPp} + P_i} \right) \quad (73)$$



Burada;

$k_{sNp}$  = Nitrojen yarı doygunluk sabiti [ $\mu\text{gN/L}$ ]

$k_{sPp}$  = Fosfor yarı doygunluk sabiti [ $\mu\text{gP/L}$ ]

**Işık Sınırı.** Su aracılığıyla ışık devrinin Beer- Lambert kanununu takip ettiği farzedilir.

$$PAR(z) = PAR(0)e^{-k_e z} \quad (74)$$

Burada;

$PAR(z)$ = Su yüzeyi aşağısında  $z$  derinlikte fotosentetik olarak elde edilebilir radyasyon [ $\text{ly/d}$ ]<sup>2</sup>  
 $k_e$  = Işık geçirgenlik katsayısı [ $\text{m}^{-1}$ ]. Su yüzeyinde  $PAR$  solar radyasyon sabit kesri olacağı farz edilir.

$$PAR(0) = 0.47 I(0) \quad (75)$$

Geçirgenlik katsayısı model değişkenleriyle ilgilidir.

$$k_e = k_{eb} + \alpha_i m_i + \alpha_o m_o + \alpha_p a_p + \alpha_{pn} a_p^{2/3} \quad (76)$$

Burada;

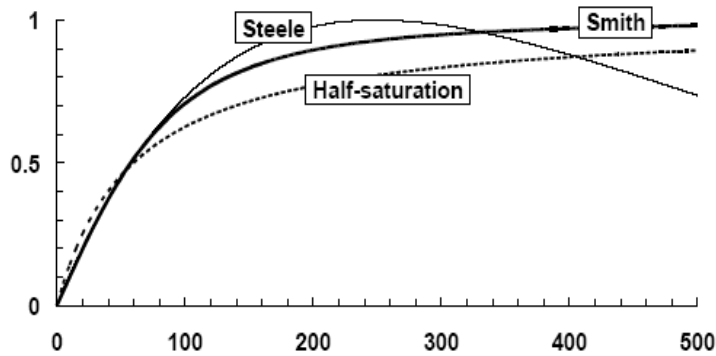
$k_{eb}$ = Su ve renkten dolayı geçirgenlik için eski katsayı tanımı [ $\text{m}$ ]

$\alpha_i$ ,  $\alpha_o$ ,  $\alpha_p$ ,  $\alpha_{pn}$  = Sırasıyla, inorganik askıda katıların [ $\text{L/mgD/m}$ ], partikül organik madde [ $\text{L/mgD/m}$ ] ve klorofil [ $\text{L}/\mu\text{gA/m}$  ve  $(\text{L}/\mu\text{gA})^{2/3}/\text{m}$ ] etkisi için tanımlanan sabitlerdir. Tablo 6' da bu katsayılar için önerilen değerler listelenmiştir. **Dip not syf 34**

**Tablo 6.** Işık geçirgenlik katsayıları için önerilen değerler

Symbol	Value	Reference
$\alpha_i$	0.052	Di Toro (1978)
$\alpha_o$	0.174	Di Toro (1978)
$\alpha_p$	0.0088	Riley (1956)
$\alpha_{pn}$	0.054	Riley (1956)

Fitoplankton fotosentezinde ışığı etkisini karakterize edecek 3 model kullanılır (Şekil 17):



Şekil 17. Işığa bağımlı dip alg fotosentezi ve fitoplankton için kullanılan üç model. Şekil  $PAR$  yoğunluğuna karşı büyüme devrini gösterir [ $\text{ly/d}$ ].

### Yarı Doygun (Michaelis-Menten) Işık Modeli:

$$F_{Lp} = \frac{I(z)}{K_{Lp} + I(z)} \quad (77)$$

$F_{Lp}$  = Işıktan dolayı fitaplankton büyüme devir sayısı

$K_{Lp}$  = Fitaplankton ışık parametresi

Yarı doyumluk durumunda modelde ışık parametresi yarı doyumluk katsayısıdır [ly/d]. Bu işlev Beer-Lambert kanunu ve  $H[m]$  su derinliğinde fitaplankton ışık devir katsayısı üretimiyle birleştirilebilir.

$$\phi_{Lp} = \frac{1}{k_e H} \ln \left( \frac{K_{Lp} + I(0)}{K_{Lp} + I(0)e^{-k_e H}} \right) \quad (78)$$

### Smith's Function:

$$F_{Lp} = \frac{I(z)}{\sqrt{K_{Lp}^2 + I(z)^2}} \quad (79)$$

Burada;

$K_{Lp}$  = Fitaplankton için Smith parametresi [ly/d]. Burada max %70.7 PAR oluşumu vardır. Bu işlev Beer-Lambert kanunu ve su derinliğindeki üremenin integraliyle birleştirilebilir.

$$\phi_{Lp} = \frac{1}{k_e H} \ln \left( \frac{I(0)/K_{Lp} + \sqrt{1 + (I(0)/K_{Lp})^2}}{(I(0)/K_{Lp})e^{-k_e H} + \sqrt{1 + ((I(0)/K_{Lp})e^{-k_e H})^2}} \right) \quad (80)$$

### Steele's Equation:

$$F_{Lp} = \frac{I(z)}{K_{Lp}} e^{1 - \frac{I(z)}{K_{Lp}}} \quad (81)$$

Burada;

$K_{Lp}$  = Fitaplanktonda PAR büyüme optimalidir [ly/d]. Bu işlev Beer-Lambert kanunu ve su derinliğindeki üremenin integraliyle birleştirilebilir.

$$\phi_{Lp} = \frac{2.718282}{k_e H} \left( e^{-\frac{I(0)}{K_{Lp}} e^{-k_e H}} - e^{-\frac{I(0)}{K_{Lp}}} \right) \quad (82)$$

### 5.3.2.2. Kayıplar

**Solunum.** Fitaplankton solunumu düşük oksijen konsantrasyonunda birinci derece tepkime hızı sabiti olarak gösterilir.

$$\text{PhytoResp} = k_{rp}(T) a_p \quad (83)$$

$k_{rp}(T)$  = Sıcaklığa bağlı fitaplankton solunum hızı [/d].

**Ölüm.** Fitaplankton ölümü birinci derece tepkimeyle gösterilir.

$$\text{PhytoDeath} = k_{dp}(T) a_p \quad (84)$$

Burada;  $k_{dp}(T)$  = Sıcaklığa bağlı fitaplankton ölüm hızı [/d].

**Çoğalma.** Fitaplankton çoğalımı aşağıdaki gibi gösterilir

$$\text{PhytoSettl} = \frac{v_a}{H} a_p \quad (85)$$

Burada; Fitaplankton çoğalım hızı [m/d].

### 5.3.3. Dip Alg ( $a_b$ )

Fotosentezden dolayı dip alg artar. Bunlar solunum ve ölüm aracılığıyla azalır.

$$S_{ab} = \text{BotAlgPhoto} - \text{BotAlgResp} - \text{BotAlgDeath} \quad (86)$$

#### 5.3.3.1. Fotosentez

Dip alg fotosentezin gösterimi Rutherford et al. (1999) tarafından geliştirilen modelin yalınlaştırılmasıdır. Fotosentez sıcaklık doğrulamalı sıfır dereceli nütrient ve ışık sınırlı bir devirde hesaplanır.

$$\text{BotAlgPhoto} = C_{gb}(T) \phi_{Nb} \phi_{Lb} \quad (87)$$

Burada;

$C_{gb}(T)$  = Sıcaklığa bağlı maksimum fotosentez hızı [gD/(m<sup>2</sup>d)]

$\phi_{Nb}$  = Dip alg nutritent devir faktörü [0 ve 1 arasında boyutsuz sayı]

$\phi_{Lb}$  = Dip alg ışık devir katsayısı [0 ve 1 arasında boyutsuz sayı].

**Sıcaklık Etkisi.** Birinci derece tepkime olarak, Arrhenius model dip alg fotosentezinde sıcaklığın etkisini ölçmek için çalıştırılır.

$$C_{gb}(T) = C_{gb}(20) \theta^{T-20} \quad (88)$$

**Nütrient Sınırı.** İnorganik nitrojen ve fosfordan dolayı büyüme sınırlamasını göstermek için Michaelis-Menten eşitlikleri kullanılır.

$$\phi_{Nb} = \min \left( \frac{n_a + n_n}{k_{sNb} + n_a + n_n}, \frac{P_i}{k_{sPb} + P_i} \right) \quad (89)$$

Burada;

$k_{sNb}$  = Nitrojen yarı doygunluk sabiti [ $\mu\text{gN/L}$ ]

$k_{sPb}$  = Fosfor yarı doygunluk sabiti [ $\mu\text{gP/L}$ ].

**Işık Sınırı.** Fitoplanktonun tersine su sütunu dibine ulaşacak PAR'ın miktarı tarafından ışık sınırı her an belirlenir. Bu miktar nehrin dibinde değerlendirilen Beer-Lambert kanunu (Eşitlik 78'e bakınız) ile hesaplanabilir.

$$I(H) = I(0)e^{-k_e H} \quad (90)$$

Fitoplankton ile ilgili, dip alg fotosentezinde ışığın etkisini karakterize edecek 3 model (81, 83 ve 85 nolu eşitlik) kullanılır. 97 nolu eşitlik bu modellerin yerine geçerek dip alg ışık devir katsayısı için aşağıdaki formülleri üretir.

Half-Saturation Light Model:

$$\phi_{Lb} = \frac{I(0)e^{-k_e H}}{K_{Lb} + I(0)e^{-k_e H}} \quad (91)$$

Smith's Function:

$$\phi_{Lp} = \frac{I(0)e^{-k_e H}}{\sqrt{K_{Lb}^2 + (I(0)e^{-k_e H})^2}} \quad (92)$$

Steele's Equation:

$$\phi_{Lb} = \frac{I(0)e^{-k_e H}}{K_{Lb}} e^{1 + \frac{I(0)e^{-k_e H}}{K_{Lb}}} \quad (93)$$

Burada;  $K_{Lb}$  = Her dip alg modeli için uygun dip alg ışık parametresi.

### 5.3.3.2. Kayıplar

**Solunum.** Dip alg solunumu düşük oksijen konsantrasyonunda devredilen birinci derece tepkime olarak gösterilir,

$$\text{BotAlgResp} = k_{rb}(T) a_b \quad (94)$$

Burada;  $k_{rb}(T)$  = Sıcaklığa bağlı dip alg solunum hızı [/d].

**Ölüm.** Dip alg ölümü birinci derece tepkimeyle gösterilir,

$$\text{BotAlgDeath} = k_{db}(T) a_b \quad (95)$$

Burada;  $k_{db}(T)$  = Sıcaklığa bağlı dip alg ölüm hızı [/d].

#### 5.3.4. Detritus ( $m_o$ )

Detritus yada partikül organik madde (PAM) bitki ölümünden dolayı artar. Bozulma ve çoğalma yoluyla azalır.

$$S_{mo} = r_{da} \text{ PhytoDeath} + \text{BotAlgDeath} - \text{DetrDiss} - \text{DetrSettl} \quad (96)$$

Burada

$$\text{DetrDiss} = k_{dt}(T)m_o \quad (97)$$

Burada  $k_{dt}(T)$  = Sıcaklığa bağlı detritus bozulma hızı [/d].

$$\text{DetrSettl} = \frac{v_{dt}}{H} m_o \quad (98)$$

Burada  $v_{dt}$  = Detritus çoğalma hızı [m/d].

#### 5.3.5. Düşük Reaksiyon CBOD ( $c_s$ )

Detritus bozulmasından dolayı düşük reaksiyon CBOD si artar. Hidroliz aracılığıyla azalır.

$$S_{cs} = r_{od} \text{ DetrDiss} - \text{SlowCHydr} \quad (99)$$

Burada

$$\text{SlowCHydr} = k_{hc}(T)c_s \quad (100)$$

$k_{hc}(T)$  = Sıcaklığa bağlı düşük CBOD hidroliz oranı [/d].

#### 5.3.6. Hızlı Reaksiyon CBOD ( $c_f$ )

Hızlı reaksiyon CBOD, düşük reaksiyon CBOD' un hidrolizinden dolayı artar. Oksidasyon ve denitrifikasyonla azalır.

$$S_{cf} = \text{SlowCHydr} - \text{FastCOxid} - r_{ondn} \text{ Denitr} \quad (101)$$

Burada

$$\text{FastCOxid} = F_{oxcf} k_{dc}(T)c_f \quad (102)$$

$k_{dc}(T)$  = Sıcaklığa bağlı hızlı CBOD oksidasyon oranı [/d].

$F_{oxcf}$  = Oksijen eksikliğinden dolayı devir sayısı [boyutsuz]

$r_{ondn}$  parametresi denitrifiye edilen nitrojen nitrat kayıp yüzdesi oksijen eşitliği oranıdır (Eşitlik 71). Denitr birimi denitrifikasyon oranıdır [ $\mu\text{gN/L/d}$ ]. Bu bölüm 5.3.10'da tanımlanacaktır.

Oksijen devir sayısını göstermek için üç formül kullanılır:

Yarı Doygunluk (Half-Saturation):

$$F_{oxrp} = \frac{o}{K_{socf} + o} \quad (103)$$

$K_{socf}$  = Hızlı CBOD oksidasyonunda oksijenin etkisi için yarı doygunluk sabiti [ $\text{mgO}_2/\text{L}$ ].

Üssel (Exponential):

$$F_{oxrp} = (1 - e^{-K_{socf}o}) \quad (104)$$

$K_{socf}$  = Hızlı CBOD oksidasyonunda oksijenin etkisi için üssel katsayı [ $\text{L}/\text{mgO}_2$ ].

İkincil Sıra Doygunluk Sabiti (Second-Order Half-Saturation):

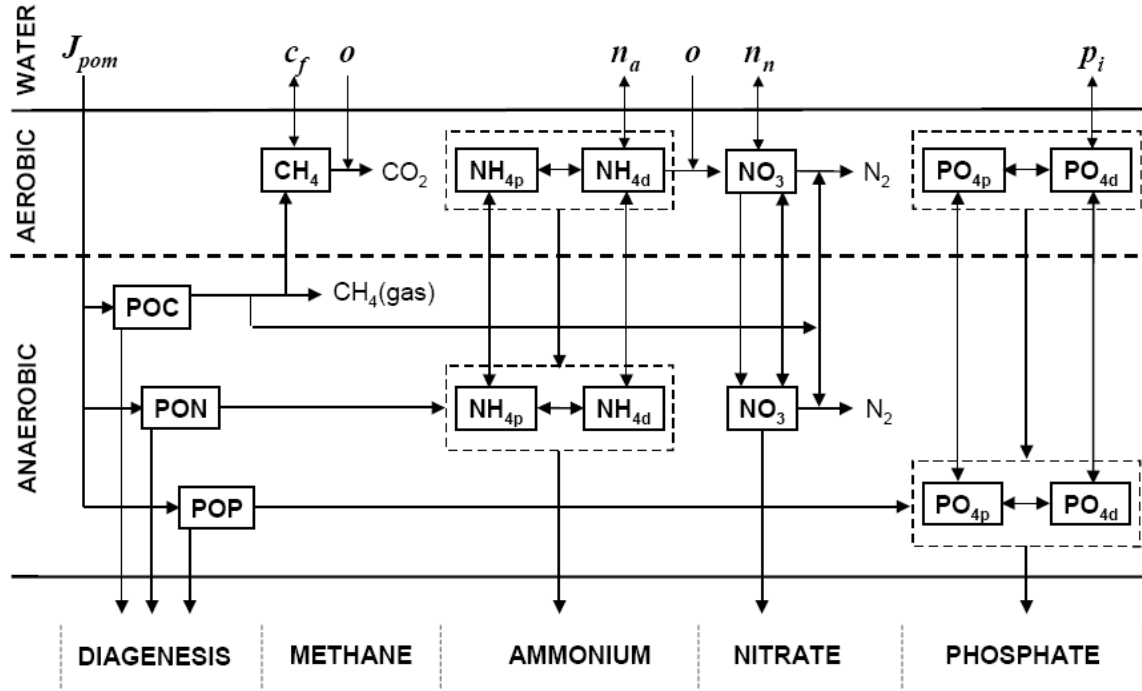
$$F_{oxrp} = \frac{o^2}{K_{socf} + o^2} \quad (105)$$

$K_{socf}$  = Hızlı CBOD oksidasyonunda oksijenin ikincil etkisi için yarı doygunluk sabiti [ $\text{mgO}_2^2/\text{L}^2$ ].

#### **5.4. Sediman Oksijen İhtiyacı (SOD) / Nütrient Değişim Modeli**

Sediment nütrient değişimleri ve (SOD) Di Toro tarafından geliştirilen bir modele dayanır. Yeni versiyonda James Martin's çabalarıyla EPA' nın WASP modeli yapısına Di Toro' nun yöntemini katması faydalı olmuştur.

Şekil 21 de modelin şeması gösterilir. Görüldüğü gibi, bu yaklaşım sudan partikül organik maddenin aşağı yönlü değişimine dayanarak oksijen ve nütrient sedimen su değişimlerinin hesaplanmasına imkan tanır. Sedimanlar iki tabakaya ayrılır: ince ( $\cong 1\text{mm}$ ) aerobik tabaka yüzeyi daha kalın (10cm) anaerobik tabaka ile kaplanır. Organik karbon, nitrojen ve fosfor partikül organik maddenin çoğalmasıyla (fitoplankton ve detritus) anaerobik sedimentlere dağılır. Orada, çözünmüş metan, amonyum ve inorganik fosfor içerisine mineralizasyon reaksiyonları vasıtasıyla taşınırlar. Bu bileşenler daha sonra metan ve amonyumun bir miktarının oksitlendiği aerobik tabakaya taşınırlar. Sediman Oksijen İhtiyacı bu oksidasyonlar için gereken sudaki oksijen değişimidir. Proses içinde de oluşturulan karbon, nitrojen ve fosforun sediman su değişimleriyle birlikte SOD değerini modelin nasıl hesapladığını gelecek bölümler ayrıntılarıyla sunacaktır.



Şekil 21. SOD-nutrient değişiminin şematik sediment modeli

#### 5.4.1. Diagenesis

Şekil 22 de özetlendiği gibi, partikül organik maddenin (POM) aşağı yönlü değişiminin kaç adet olduğunu belirlemeyi gerektiren hesaplamanın ilk aşaması anaerobik sedimanları çözünür reaktif formlara dönüştürmektir. Bu proses **diagenesis** olarak ta bilinir. İlk toplam aşağı yönlü değişimin su sütunundan detritus çoğalımı ve fitoplankton değişimleri toplamı olarak hesaplanır.

$$J_{POM} = r_{da} v_a a_p + v_{dt} m_o \quad (166)$$

$J_{POM}$  = POM nin aşağı yönlü değişimi [ $\text{gDm}^{-2}\text{d}^{-1}$ ]

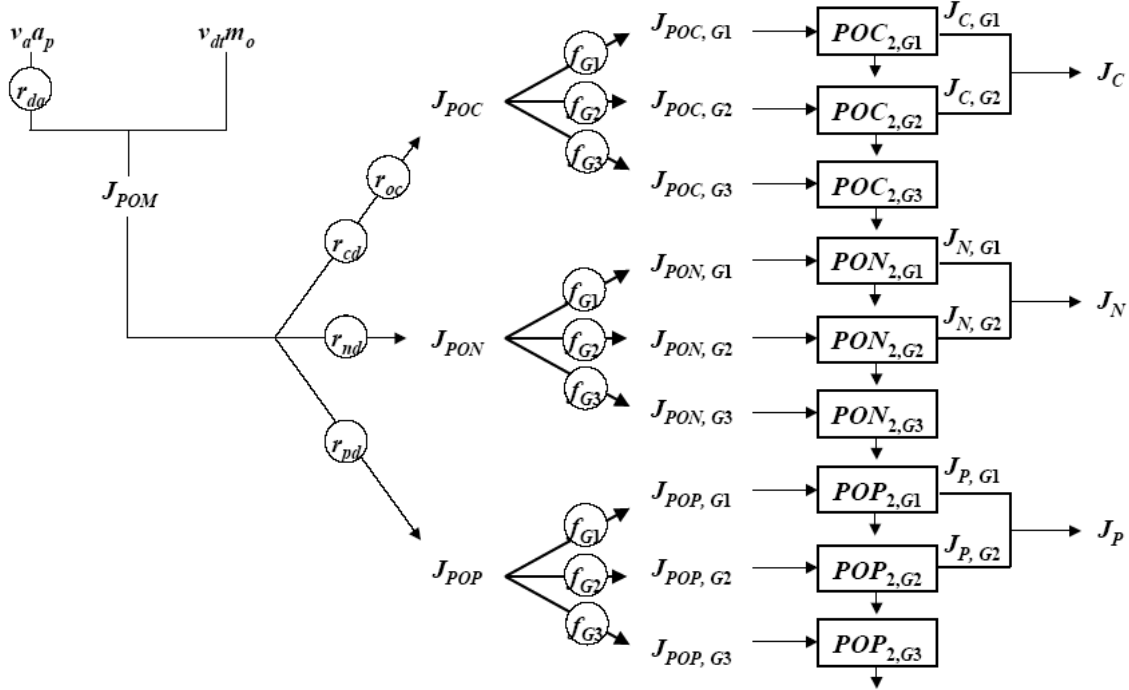
$r_{da}$  = Klorofil a da kuru ağırlık oranı [ $\text{gD/mgA}$ ]

$v_a$  = Fitaplankton çoğalım hızı [ $\text{m/d}$ ]

$a_p$  = Fitaplankton konsantrasyonu [ $\text{mgA/m}^3$ ]

$v_{dt}$  = Detritus çoğalım hızı [ $\text{m/d}$ ]

$m_o$  = Detritus konsantrasyonu [ $\text{gD/m}^3$ ]



Şekil 22. Partikül organik tanelerin (fitoplankton ve detritus) nasıl çoğaldığının gösterimi

POM değişimi içerisinde karbon, nitrojen ve fosforu ayırmak için daha sonra stokiyometrik bağıntılar kullanılır. Not: Stokiyometrik katsayı  $r_{oc}$  kullanarak oksijen eşitlikleri olarak partikül organik karbonu (POC) göstereceğiz. Nutrient değişimlerinin her biri daha ileri 3 reaktif fraksiyonuna ayrılır: labile (G1), düşük tepki(G2) ve tepkisiz (G3).

Bu değişimler daha sonra anaerobik tabakada her fraksiyonun konsantrasyonunu hesaplamak için kütle dengesi içine girilir. Örneğin, labile POC için kütle dengesi aşağıdaki gibi yazılır

$$H_2 \frac{dPOC_{2,G1}}{dt} = J_{POC,G1} - k_{POC,G1} \theta_{POC,G1}^{T-20} H_2 POC_{2,G1} - w_2 POC_{2,G1} \quad (167)$$

Burada;

$H_2$  = Anaerobik tabaka kalınlığı [m]

$POC_{2,G1}$  = Anaerobik tabakada POC un labile fraksiyonunun konsantrasyonu [ $gO_2/m^3$ ]

$J_{POC,G1}$  = Anaerobik tabakaya dağılan labile POC un değişimi [ $gO_2/m^2/d$ ]

$k_{POC,G1}$  = Labile POC un mineralizasyon hızı [ $d^{-1}$ ]

$\theta_{POC,G1}$  = Labile POC mineralizasyon için sıcaklık düzeltme faktörü [boyutsuz]

$w_2$  = Yok olma (burial) hızı

Sabit durumda, eşitlik 166 çözülebilir

$$POC_{2,G1} = \frac{J_{POC,G1}}{k_{POC,G1} \theta_{POC,G1}^{T-20} H_2 + w_2} \quad (168)$$

Labile çözülmüş karbonun akışı,  $J_{C,G1}$  [ $gO_2/m^2/d$ ], aşağıdaki gibi hesaplanabilir

$$J_{C,G1} = k_{POC,G1} \theta_{POC,G1}^{T-20} H_2 POC_{2,G1} \quad (169)$$



Aynı biçimde, düşük tepkili çözünmüş organik karbon için kütle dengesi çözülebilir ve yazılabilir. Anaerobik sedimentte oluşan çözünmüş karbonun toplam değişimine ulaşmak için bu sonuç daha sonra 168 nolu eşitliğe eklenebilir.

$$J_C = J_{C,G1} + J_{C,G2} \quad (170)$$

Benzer eşitlikler nitrojenin diagenesis değişimlerini hesaplamak için geliştirilir,  $J_N$  [gN/m<sup>2</sup>/d] ve fosfor  $J_P$  [gP/m<sup>2</sup>/d].

### 5.4.2. Amonyum

Şekil 21 de gösterilen mekanizmaya dayanarak aerobik ve anaerobik tabakada toplam amonyum için kütle denklemleri yazılabilir.

$$H_1 \frac{dNH_{4,1}}{dt} = \omega_{12} (f_{pa2} NH_{4,2} - f_{pa1} NH_{4,1}) + K_{L12} (f_{da2} NH_{4,2} - f_{da1} NH_{4,1}) - w_2 NH_{4,1} \quad (171)$$

$$+ s \left( \frac{n_a}{1000} - f_{da1} NH_{4,1} \right) - \frac{\kappa_{NH4,1}^2}{s} \theta_{NH4}^{T-20} \frac{K_{NH4}}{K_{NH4} + NH_{4,1}} \frac{o}{2K_{NH4,O2} + o} f_{da1} NH_{4,1}$$

$$H_2 \frac{dNH_{4,2}}{dt} = J_N + \omega_{12} (f_{pa1} NH_{4,1} - f_{pa2} NH_{4,2}) + K_{L12} (f_{da1} NH_{4,1} - f_{da2} NH_{4,2}) \quad (172)$$

$$+ w_2 (NH_{4,1} - NH_{4,2})$$

$H_1$  = Aerobik tabakanın kalınlığı [m]

$NH_{4,1}$  ve  $NH_{4,2}$  = Sırasıyla aerobik ve anaerobik tabakada toplam amonyum konsantrasyonu [gN/m<sup>3</sup>]

$n_a$  = Sudaki amonyum konsantrasyonu [mgN/m<sup>3</sup>]

$K_{NH4,1}$  = Aerobik sedimentte nitrifikasyon için hız sabiti [m/d]

$\theta_{NH4}$  = Nitrifikasyon için sıcaklık düzeltme faktörü [boyutsuz]

$K_{NH4}$  = Amonyum yarı doyumluk sabiti [gN/m<sup>3</sup>]

$o$  = Su yüzeyindeki çözünmüş oksijen konsantrasyonu [gO<sub>2</sub>/m<sup>3</sup>]

$K_{NH4,O2}$  = Oksijen yarı doyumluk sabiti [mgO<sub>2</sub>/L]

$J_N$  = Amonyumun diagenesis değişimi [gN/m<sup>2</sup>/d].

Partikül ( $f_{pai}$ ) ve çözünmüş ( $f_{dai}$ ) formda amonyum fraksiyonu aşağıdaki gibi hesaplanabilir

$$f_{dai} = \frac{1}{1 + m_i \pi_{ai}} \quad (173)$$

$$f_{pai} = 1 - f_{dai} \quad (174)$$

$m_i$  = i tabakasında katı konsantrasyonu [gD/m<sup>3</sup>]

$\pi_{ai}$  = i tabakasında amonyumun ayrılma katsayısı [m<sup>3</sup> /gD]

Tabakalar arasındaki biyotürlülansdan dolayı partikül karışımı için kütle transfer katsayısı,  $\omega_{12}$  [m/d], aşağıdaki gibi hesaplanabilir

$$\omega_{12} = \frac{D_p \theta_{Dp}^{T-20}}{H_2} \frac{POC_{2,G1} / r_{oc}}{POC_R} \frac{o}{K_{M,Dp} + o} \quad (175)$$

$D_p$  = Biotürbülasyon için difüzyon katsayısı [ $m^2/d$ ]

$\theta_{Dp}$  = Sıcaklık katsayısı [boyutsuz]

$POC_R$  = Biotürbülasyon için GI konsantrasyon referansı [ $gC/m^3$ ]

$K_{M,Dp}$  = Biotürbülasyon için oksijen yarı doygunluk sabiti [ $gO_2/m^3$ ]

Tabakalar arasında su difüzyon porozitesi için kütle transfer katsayısı,  $K_{L12}$  [ $m/d$ ], aşağıdaki gibi hesaplanabilir.

$$K_{L12} = \frac{D_d \theta_{Dd}^{T-20}}{H_2 / 2} \quad (176)$$

$D_d$  = Pore su difüzyon katsayısı [ $m^2/d$ ]

$\theta_{Dd}$  = Sıcaklık katsayısı [boyutsuz]

Su ve aerobik sediman arasındaki kütle transfer katsayısı,  $s$  [ $m/d$ ], aşağıdaki gibi hesaplanabilir.

$$s = \frac{SOD}{o} \quad (177)$$

$SOD$  = Sedimen Oksijen İhtiyacı [ $gO_2/m^2/d$ ].

Sabit durumda, 170 ve 171 nolu eşitlikler eş zamanlı nonlinear cebirsel eşitliklerdir. Nitrifikasyon için Monod teriminde  $NH_{4,1}$  sabit olduğunu varsayarak bu eşitlikler lineerize edilebilir. Daha sonra  $NH_{4,1}$  ve  $NH_{4,2}$  için eş zamanlı lineer eşitlikler çözülebilir. Sudaki amonyum değişimi aşağıdaki gibi hesaplanabilir.

$$J_{NH_4} = s \left( f_{dal} NH_{4,1} - \frac{n_a}{1000} \right) \quad (178)$$

### 5.4.3. Nitrat

Aerobik ve anaerobik tabakalar için nitratın kütle dengesi şu şekilde yazılabilir

$$H_1 \frac{dNO_{3,1}}{dt} = K_{L12} (NO_{3,2} - NO_{3,1}) - w_2 NO_{3,1} + s \left( \frac{n_n}{1000} - NO_{3,1} \right) + \frac{\kappa_{NH_{4,1}}^2}{s} \theta_{NH_4}^{T-20} \frac{K_{NH_4}}{K_{NH_4} + NH_{4,1}} \frac{o}{2K_{NH_4,O_2} + o} f_{dal} NH_{4,1} - \frac{\kappa_{NO_{3,1}}^2}{s} \theta_{NO_3}^{T-20} NO_{3,1} \quad (179)$$

$$H_2 \frac{dNO_{3,2}}{dt} = J_N + K_{L12} (NO_{3,1} - NO_{3,2}) + w_2 (NO_{3,1} - NO_{3,2}) - \kappa_{NO_{3,2}} \theta_{NO_3}^{T-20} NO_{3,2} \quad (180)$$

$NO_{3,1}$  ve  $NO_{3,2}$  = Sırasıyla aerobik ve anaerobik tabakalar için nitrat konsantrasyonu [ $gN/m^3$ ]

$n_n$  = Sudaki nitrat konsantrasyonu [ $mgN/m^3$ ]

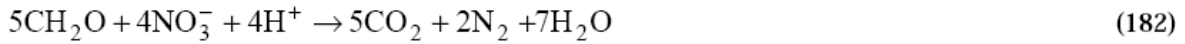
$K_{NO3,1}$  ve  $K_{NO3,2}$  = Sırasıyla aerobik ve anaerobik sedimanlarda denitrifikasyon için tepkime sabiti [m/d]

$\theta_{NO3}$  = Denitrifikasyon için sıcaklık düzeltme faktörü [boyutsuz]

Aynı biçimde 170 ve 171 nolu eşitlikler için 178 ve 179 nolu eşitlik  $NO_{3,1}$  ve  $NO_{3,2}$  için çözülebilir ve lineerize edilebilir. Sudaki nitrat değişimi daha sonra aşağıdaki gibi hesaplanabilir.

$$J_{NO3} = s \left( NO_{3,1} - \frac{n_n}{1000} \right) \quad (181)$$

Aşağıdaki kimyasal eşitlikte gösterildiği gibi denitrifikasyon için karbon kaynağına ihtiyaç duyulur.



Karbon gereksinimi (oksijen eşitliklerinde görülen nitrojen yüzdesi) daha sonra aşağıdaki gibi hesaplanabilir.

$$r_{ondn} = 2.67 \frac{gO_2}{gC} \frac{5 \text{ moleC} \times 12 \text{ gC/moleC}}{4 \text{ moleN} \times 14 \text{ gN/moleN}} \times \frac{1 \text{ gN}}{1000 \text{ mgN}} = 0.00286 \frac{gO_2}{mgN} \quad (183)$$

Bu yüzden, oksijen eşitlikleri denitrifikasyon süresince tüketilir,  $J_{O2,dn}$  [ $gO_2/m^2/d$ ], aşağıdaki gibi hesaplanabilir.

$$J_{O2,dn} = 1000 \frac{mgN}{gN} \times r_{ondn} \left( \frac{\kappa_{NO3,1}^2}{s} \theta_{NO3}^{T-20} NO_{3,1} + \kappa_{NO3,2} \theta_{NO3}^{T-20} NO_{3,2} \right) \quad (184)$$

#### 5.4.4. Metan

Diagenesis tarafından üretilen çözünmüş karbon anaerobik sedimanda metana dönüştürülür. Çünkü metan oldukça çözünmezdir, üretilen metan gazı ile doygunluk aşılabılır. Sonuç olarak, anaerobik tabakada metan için kütle dengesi yazmaktansa, Di Toro' nun geliştirdiği analitik model aerobik tabakaya gönderilen gaz azalımı için çözünmüş metan düzeltmesinin sabit durumlu değişimi tanımlamak için kullanılır.

İlk olarak, denitrifikasyon süresince harcanan oksijen eşitlikleri için karbon diagenesis değişimi doğrulanır.

$$J_{CH4,T} = J_C - J_{O2,dn} \quad (185)$$

Burada  $J_{CH4,T}$  = Denitrifikasyon için düzeltilen karbon diagenesis değişimi [ $gO_2/m^2/d$ ]. Diğer tarafta, bu oksijen eşitliklerinde gösterilen toplam anaerobik metan üretim değişimidir.

$J_{CH4,T}$  yeteri kadar büyükse ( $\geq 2K_{L12}C_s$ ), metan gazı görünecektir. Böyle durumlarda, değişim gaz kaybı için doğrulanabilir,

$$J_{CH4,d} = \sqrt{2K_{L12}C_s J_{CH4,T}} \quad (186)$$

Burada  $J_{CH4,d}$  = Aerobik sedimana gönderilen ve anaerobik sedimanda üretilen çözünmüş metan değişimi (oksijen eşitliklerinde gösterilen) [ $gO_2/m^2/d$ ].

$C_s$  = Oksijen eşitliklerinde gösterilen metanın doygunluk konsantrasyonu [ $mgO_2/L$ ].

$J_{CH_4,T} < 2K_{L12}C_s$  ise, gaz formu görülmez ve

$$J_{CH_4,d} = J_{CH_4,T} \quad (187)$$

Metan doygunluk konsantrasyonu aşağıdaki gibi hesaplanabilir

$$C_s = 100 \left( 1 + \frac{H}{10} \right) 1.024^{20-T} \quad (188)$$

Burada; H = Su derinliği (m) T = Su sıcaklığı [ $^{\circ}$ C].

Aerobik tabaka için metan kütle dengesi daha sonra aşağıdaki gibi yazılabilir,

$$H_1 \frac{dCH_{4,1}}{dt} = J_{CH_4,d} + s(c_f - CH_{4,1}) - \frac{\kappa_{CH_4,1}^2}{s} \theta_{CH_4}^{T-20} CH_{4,1} \quad (189)$$

$CH_{4,1}$  = Aerobik tabakada metan konsantrasyonu [ $gO_2/m^3$ ]

$c_f$  = Su yüzeyindeki hızlı CBOD [ $gO_2/m^3$ ]

$K_{CH_4,1}$  = Aerobik sedimanda metan oksidasyonu için tepkime hızı [m/d]

$\theta_{CH_4}$  = Sıcaklık düzeltme faktörü [boyutsuz]

Kararlı durumda bu denge şu şekilde çözülebilir;

$$CH_{4,1} = \frac{J_{CH_4,d} + s c_f}{s + \frac{\kappa_{CH_4,1}^2}{s} \theta_{CH_4}^{T-20}} \quad (190)$$

Sudaki metan değişimi,  $J_{CH_4}$  [ $gO_2/m^2/d$ ], aşağıdaki gibi hesaplanabilir

$$J_{CH_4} = s(CH_{4,1} - c_f) \quad (191)$$

#### 5.4.5. SOD

SOD [ $gO_2/m^2/d$ ] nitrifikasyon ve metan oksidasyonunda tüketilen oksijen toplamına eşittir.

$$SOD = CSOD + NSOD \quad (192)$$

CSOD = Metan oksidasyonu ile üretilen oksijen ihtiyacı miktarı [ $gO_2/m^2/d$ ]

NSOD = Nitrifikasyonla üretilen oksijen ihtiyacı miktarı [ $gO_2/m^2/d$ ]. Bu aşağıdaki gibi hesaplanabilir

$$CSOD = \frac{\kappa_{CH_4,1}^2}{s} \theta_{CH_4}^{T-20} CH_{4,1} \quad (193)$$

$$NSOD = r_{on} \frac{\kappa_{NH_4,1}^2}{s} \theta_{NH_4}^{T-20} \frac{K_{NH_4}}{K_{NH_4} + NH_{4,1}} \frac{o}{2K_{NH_4,O_2} + o} f_{dal} NH_{4,1} \quad (194)$$

Burada  $r_{on}$  = Nitrifikasyon süresince üretilen nitrojene oksijenin oranı [= 4.57  $gO_2/gN$ ].

#### 5.4.6. İnorganik Fosfor

Aerobik ve anaerobik tabakalarda toplam inorganik karbon için kütle dengeleri aşağıdaki gibi yazılır,

$$H_1 \frac{dPO_{4,1}}{dt} = \omega_{12} (f_{pp2} PO_{4,2} - f_{pp1} PO_{4,1}) + K_{L12} (f_{dp2} PO_{4,2} - f_{dp1} PO_{4,1}) - w_2 PO_{4,1} + s \left( \frac{P_i}{1000} - f_{da1} PO_{4,1} \right) \quad (195)$$

$$H_2 \frac{dPO_{4,2}}{dt} = J_P + \omega_{12} (f_{pp1} PO_{4,1} - f_{pp2} PO_{4,2}) + K_{L12} (f_{dp1} PO_{4,1} - f_{dp2} PO_{4,2}) + w_2 (PO_{4,1} - PO_{4,2}) \quad (196)$$

$PO_{4,1}$  ve  $PO_{4,2}$  = Sırasıyla aerobik ve anaerobik tabakalarda toplam inorganik fosfor konsantrasyonu [ $gP/m^3$ ]

$p_i$  = Sudaki inorganik fosfor [ $mgP/m^3$ ]

$J_P$  = Fosforun diagenesis değişimi [ $gP/m^2/d$ ].

Partikül ve çözünmüş formda fosfor fraksiyonları,

$$f_{dpi} = \frac{1}{1 + m_i \pi_{pi}} \quad (197)$$

$$f_{ppi} = 1 - f_{dpi} \quad (198)$$

Burada  $\pi_{pi}$  = i tabakasında inorganik fosforun bölünme katsayısı [ $m^3/gD$ ].

Anaerobik tabakada bölünme katsayısı girdi değerine yerleştirilir. Aerobik tabaka için, sudaki oksijen konsantrasyonu kritik konsantrasyon sınırına ulaşırsa,  $o_{crit}$  [ $gO_2/m^3$ ], o zaman bölünme katsayısı demir hidroksit üzerine fosforun adsorpsiyonunu göstermek için artırılır

$$\pi_{p1} = \pi_{p2} (\Delta \pi_{PO_{4,1}}) \quad (199)$$

$\Delta \pi_{PO_{4,1}}$  = Anaerobik katsayıyla ilişkili aerobik tabaka bozulma katsayısını artıran faktör

Oksijen konsantrasyonu  $o_{crit}$  altına düşerse, bozulma katsayısı oksijen sıfırda anaerobik değere ulaşana kadar düzgünce azaltılır.

$$\pi_{p1} = \pi_{p2} (\Delta \pi_{PO_{4,1}})^{o/o_{crit}} \quad (200)$$

194 ve 195 nolu eşitlikler  $PO_{4,1}$  ve  $PO_{4,2}$  için çözülebilir. Sudaki fosfor değişimleri daha sonra aşağıdaki gibi hesaplanabilir

$$J_{PO_4} = s \left( PO_{4,1} - \frac{P_i}{1000} \right) \quad (201)$$

#### 5.4.7. Çözüm Hazırlama

Yukarıda artarda sıralanan eşitliklerin çözülebilmesine rağmen, eşitliklerin birbirine bağlı olmasından dolayı tek bir hesaplama doğru sonucu getirmeyecektir. Örneğin, yüzey kütle transfer katsayısı SOD değerine bağlıdır. SOD bir anlamda amonyak ve metan

konsantrasyonlarına bağlıdır ki bu s'ye bağlı kütle dengelerinden hesaplanır. Bu yüzden, tekrarlı teknik kullanılmalıdır. QUAL2K da kullanılan prosedür şu şekildedir:

1. Diagenesis değişimleri tanımlama:  $J_C$ ,  $J_N$ ,  $J_P$ .
2. SOD' nın ilk değeri ile başlama,

$$SOD_{init} = J_C + r'_{on} J_N \quad (202)$$

Burada;  $r'_{on}$  = Nitrifikasyon/denitrifikasyon aracılığıyla nitrojen gazına amonyumun toplam dönüşümü için tüketilen nitrojene oksijenin oranı [= 1.714 gO<sub>2</sub>/gN]. Bu oran denitrifikasyon için kullanılan karbon miktarıdır.

3. Kullanılacak Hesaplamalar

$$s = \frac{SOD_{init}}{o} \quad (203)$$

4. Amonyum, nitrat ve metanın çözümü ve CSOD ve NSOD hesaplama
5. Aşağıdaki ağırlık ortalamasını kullanarak SOD' un düzeltilmiş değerini oluşturun.

$$SOD = \frac{SOD_{init} + CSOD + NSOD}{2} \quad (204)$$

6. Yaklaşık nispi hatayı hesaplayarak yaklaşımı kontrol et

$$\varepsilon_a = \left| \frac{SOD - SOD_{init}}{SOD} \right| \times 100\% \quad (205)$$

7.  $\varepsilon_a$ ,  $\varepsilon_s$  sonuç kriterinden daha büyükse o zaman  $SOD_{init} = SOD$  yapılır ve ikinci adıma geri dönlür.
8. Yaklaşım uygunsa ( $\varepsilon_a \leq \varepsilon_s$ ), inorganik fosfor konsantrasyonu hesaplanır.
9. Amonyum, nitrat, metan ve fosfor değişimleri hesaplanır.

#### 5.4.8. İlave Değişimler

Yazın sabit durum periyodunda (örneğin ilkbahar akışları süresince) öncelikli bırakılan organik madde varlığından dolayı, partikül organik maddenin düşen değişimi gözlemlenen SOD oluşturmak için yetersizdir. Böyle durumlarda, SOD ilavesi tavsiye edilebilir.

$$SOD_t = SOD + SOD_s \quad (206)$$

Burada;

$SOD_t$  = Toplam sediman oksijen ihtiyacı [gO<sub>2</sub>/m<sup>2</sup>/d]

$SOD_s$  = İlave SOD [gO<sub>2</sub>/m<sup>2</sup>/d]

Ek olarak, tavsiye edilen amonyum ve metan değişimleri hesaplanan değişimlere ilave olarak kullanılabilir.

