

بررسی انتقال کادمیوم در خاک لومی دست‌نخورده با مدل FADE

سمیرا مرسلی^۱، حسین بابازاده^{۲*}، شهرام شاه‌محمدی کلالق^۳ و حسین صدقی^۲

(۱) دانشجوی رشته دکتری آبیاری و زهکشی، گروه علوم و مهندسی آب، واحد علوم و تحقیقات، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران.

(۲) استاد گروه علوم و مهندسی آب، واحد علوم و تحقیقات، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران.

*پارانه نویسنده مسئول مکاتبات: h_babazadeh@srbiau.ac.ir

(۳) دانشیار گروه علوم و مهندسی آب، واحد تبریز، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران.

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۵/۳۰

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۰۳/۰۲

چکیده

بیان صحیح و دقیق انتقال آلاینده‌ها در محیط متخلخل از اهمیت بالایی برای ارزیابی و اصلاح آنها در خاک و آبخوان‌ها برخوردار است. جنبه مهم در انتقال املاح و آلاینده‌ها، استفاده از مدل‌های مناسب برای توصیف رفتار انتقال آنها است. در این مطالعه غلظت فلز سنگین کادمیوم در ستون خاک لومی دست‌نخورده با استفاده از آزمایش جانشینی اختلاط‌پذیر اندازه‌گیری شد. این آزمایش در سه غلظت اولیه (۵۰، ۱۰۰ و ۱۵۰ میلی‌گرم بر لیتر) تکرار شد. سپس انتقال فلز Cd توسط مدل کسری انتقال-پخش (FADE) شبیه‌سازی شد. منحنی‌های رخنه حاصل از شبیه‌سازی مدل مذکور و نتایج آزمایش‌های برازش داده شده و تاثیر غلظت بر عملکرد آن بررسی گردید. پارامترهای درجه کسری (α)، ضریب پخش (D) و فاکتور تاخیر (R) در هر سه غلظت اولیه با استفاده از روش مسئله معکوس برآورد و مقایسه شد. نتایج نشان داد مدل FADE انتقال فلز کادمیوم را با $RMSE=0.98$ و $R^2=0.95$ به خوبی شبیه‌سازی می‌کند. مقایسه منحنی‌های رخنه برازش داده شده توسط مدل FADE و داده‌های آزمایشگاهی نیز موید این موضوع است. همچنین مقدار α در هر سه غلظت اولیه تقریباً با هم برابر و مساوی ۱/۷ می‌باشد که نشان‌دهنده انتقال نامتعارف Cd است. به نظر می‌رسد عدم اثرگذاری C_0 بر پارامتر درجه کسری که پارامتر اصلی مدل FADE است، باعث شده عملکرد مدل مذکور با تغییرات غلظت اولیه روند خاصی نداشته و قابل چشم‌پوشی باشد. با افزایش غلظت اولیه، فرآیند پخشیدگی در انتقال فلز کادمیوم افزایش یافته و روند آن غیرخطی و غیرقابل پیش‌بینی می‌شود و رابطه فاکتور تاخیر با غلظت اولیه معکوس می‌باشد.

واژه‌های کلیدی: انتقال فلزات، غلظت اولیه، کادمیوم، کسری انتقال-پخش، FADE.

مقدمه

که برای مدل‌سازی انتقال املاح و آلاینده‌ها در محیط‌های متخلخل همگن و مقیاس آزمایشگاهی مورد استفاده قرار گرفته است (Huang et al., 2005; Jury, 1982). اما قابلیت این مدل در پیش‌بینی رفتار و انتقال املاح در محیط‌های ناهمگن ناکارآمد گزارش شده است (Berkowitz et al., 2008; Huang et al., 2005). خاک‌های همگن به ندرت در طبیعت یافت شده و آکیفرها غالباً غیرهمگن بوده و سرعت جریان آب با غیرهمگنی محیط به شدت تغییر می‌یابد، بنابراین فرآیند انتقال

انتقال آلاینده‌ها از جمله فلزات سنگین در محیط‌های متخلخل و آب‌های زیرزمینی از موضوع‌های مهم و اساسی است که به جهت مسایل زیست محیطی و تهدید حیات موجودات زنده از جمله انسان، یکی از نگرانی‌های مهم عصر حاضر جوامع علمی بوده و در این راستا مطالعات تئوریک و آزمایشگاهی مختلفی جهت درک و فهم رفتار انتقال این آلاینده‌ها با استفاده از کاربرد مدل‌های مناسب صورت گرفته است. معادله انتقال توده‌ای-پخش^۱ (CDE) اولین مدلی است

خاک‌های غیراشباع (Shahmohammadi-Kalalagh *et al.*, 2011; Pechevsky *et al.*, 2000; Deng *et al.*, 2004; Chang *et al.*, 2005; Huang *et al.*, 2006; Zaheer *et al.*, 2017) توسط مدل FADE توصیف شده که از آن به عنوان مدل موثر و کارآمد یاد شده است. معادله FADE در تحقیقات هیدرولوژیکی نیز برای شبیه‌سازی حمل و نقل نامتعارف املاح در آب‌های سطحی و زیرسطحی استفاده شده است (Sun *et al.*, 2020) که با استفاده از پارامتر درجه کسری، یک رویکرد جدید برای بهبود درک در مورد انتقال املاح در تداخل با تعاملات رودخانه-آب زیرزمینی ارائه می‌کند (Xu *et al.*, 2022). همچنین اختلاط نامتعارف و واکنش بین گونه‌های شیمیایی متعدد توسط مدل FADE شبیه‌سازی شده است (Bolster *et al.*, 2010; Bolster *et al.*, 2013).

Pechevsky و همکاران (2000) و Sharma و همکاران (2020) کاربرد FADE را برای فرآیندهای انتقال براساس غیرهمگنی خاک‌ها اثبات کرده‌اند. همچنین آنها قابلیت پیش‌بینی دو مدل CDE و FADE را براساس آزمایش‌های آماری مقایسه کردند و دریافتند که FADE منحنی‌های رخنه (BTCs) را بهتر از CDE شبیه‌سازی می‌کند. Zhi-ming و همکاران (2012) در پژوهشی به مدل‌سازی انتقال کادمیوم در ستون‌های خاک با طول ۵۰ سانتی‌متر و قطر ۱۲/۵ سانتی‌متر با هدف مطالعه و بررسی پارامترهای معادله CDE در انتقال کادمیوم و همچنین بررسی تغییر پارامترها با تغییر عمق پرداختند. نتایج ایشان نشان داد ضریب انتشار هیدرودینامیک (D) به عمق خاک وابستگی زیادی دارد. Huang و همکاران (2005) با کمک مدل FADE انتقال نیترات آمونیوم (NH_4NO_3) و کادمیوم (Cd) را در خاک اشباع لوم‌شنی بررسی کردند. نتایج مطالعات آنها حاکی از برازش بهتر منحنی رخنه توسط مدل FADE در مقایسه با CDE است. به‌طور خلاصه، توان کسری مشتق (α) موجب توصیف بهتر انتقال نامتعارف بوده و FADE، مدل انتقال املاح کارآمد برای توضیح فرآیند انتقال املاح در محیط‌های متخلخل طبیعی با درجات ناهمگنی مختلف است (Moradi & Mehdinejadani, 2020). بعضی از این موفقیت‌ها را می‌توان به سادگی FADE نسبت داد: طیف گسترده‌ای از رفتار مشاهده شده در محیط ناهمگن با یک مدل خلاصه شده و فقط با چهار پارامتر به‌دست می‌آید (Kelly & Meerschaert, 2007; Zhang & Benson, 2008).

املاح در این محیط‌ها پیچیده بوده و غلظت‌های اندازه‌گیری شده غالباً بیشتر از میزان برآورد شده توسط مدل CDE در قسمت اولیه منحنی‌های رخنه^۱ (BTCs) و کمتر از میزان برآورد شده توسط مدل مذکور در قسمت انتهایی منحنی‌های رخنه می‌باشد. بنابراین منحنی‌های رخنه برخلاف خاک‌های همگن که معمولاً شکل متقارن دارند کشیده‌تر خواهند بود. از این پدیده به‌عنوان انتقال نامتعارف^۲ یا انتقال غیرفیکسی^۳ یاد می‌شود (Berkowitz *et al.*, 2008; Berkowitz & Scher, 1995). بنابراین به‌منظور مدل‌سازی انتقال املاح در محیط‌های ناهمگن و توصیف رفتار نامتعارف مواد نیاز است مدل CDE اصلاح شده و توسعه یابد. بنابراین مدل‌های زیادی از جمله مدل‌های روان-راکد (MIM) (Van Genuchten & Wierenga, 1977; Bond & Wierenga, 1990) مدل حرکت تصادفی با زمان پیوسته (CTRW) (Berkowitz & Scher, 2009; Berkowitz & Scher, 1997) و مدل کسری انتقال-پخش FADE برای بهبود مدل CDE بسط یافتند.

مدل FADE توسط Benson (1998) و همکاران (2000a) و Benson و همکاران (2000b) بر اساس نظریه حرکت لوی^۴ ارائه گردید. آنها با استفاده از این نظریه، توزیع مکانی و زمانی غلظت آلاینده در محیط متخلخل را توصیف نموده و یک رابطه دیفرانسیلی جزئی کسری تحت عنوان «رابطه کسری انتقال - پخش» یا (FADE) به‌دست آوردند. ایده اصلی FADE آن بود که ذرات جرم برخلاف حرکت براونی که اساس مدل CDE می‌باشد، تحت حرکت لوی می‌باشند و شار پخش متناسب با مشتق کسری غلظت جرم به جای مشتق صحیح که در CDE فرض می‌شود، است و تاثیر غیرهمگنی محیط متخلخل بر انتقال جرم و آلاینده به وسیله توان مشتق کسری (α) مذکور منعکس می‌شود. این مدل همچنان در حال به‌روزرسانی و توسعه است. توانایی FADE برای توضیح حمل و نقل مواد در محیط‌های متخلخل توسط محققان مختلف طی سال‌های گذشته مورد مطالعه قرار گرفته است. از زمان ارائه این مدل توسط Benson (1998) تا به حال، به‌عنوان یک مدل موثر برای شبیه‌سازی انتقال نامتعارف یا نامتعارف جرم تاکید شده است (Benson *et al.*, 2000a; Benson *et al.*, 2000b; Benson *et al.*, 2001; Benson *et al.*, 2004; Zhang *et al.*, 2007; Zhang & Benson, 2008).

1 Breakthrough curves

2 Anomalous transport

3 Non-Fickian

4 Levy

بررسی انتقال کادمیوم در خاک لومی دست‌نخورده با مدل FADE/81

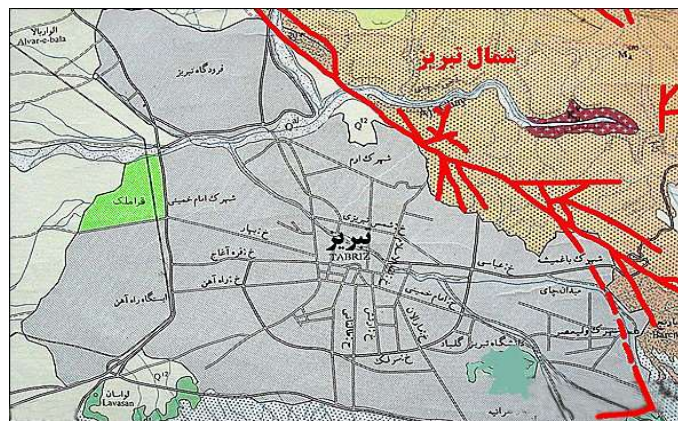
مذکور محسوب می‌شود (شاه‌محمدی‌کلاتی، ۱۳۹۰)، بنابراین در پژوهش حاضر انتقال فلز کادمیوم در غلظت‌های اولیه متفاوت توسط مدل FADE شبیه‌سازی شد. از آنجایی که تعیین تمامی پارامترهای انتقال توسط آزمایش بسیار وقت‌گیر و دارای خطای زیادی می‌باشد، از روش مدل‌سازی معکوس جهت برآورد آنها استفاده گردید و پس از تعیین هر یک از پارامترهای انتقال فلز Cd در مدل FADE، تاثیر غلظت اولیه فلز مذکور در چگونگی فرآیند انتقال بررسی شد. به‌منظور تطبیق بیشتر شرایط آزمایشگاهی با شرایط طبیعی انتقال جرم در خاک و شبیه‌سازی دقیق‌تر آن، مطالعه‌های آزمایشگاهی در خاک طبیعی (دست‌نخورده) انجام گرفت، زیرا خاک‌های همگن به ندرت در طبیعت یافت شده و آکیفرها غالباً غیرهمگن می‌باشند.

مواد و روش‌ها

روش آزمایش

نمونه‌های خاک لوم مورد نظر از مزرعه‌ای در منطقه قراملک واقع در غرب شهر تبریز با موقعیت جغرافیایی "۵۹/۸۹' ۵' ۳۸° شمالی و "۳۸' ۱۲' ۴۵° شرقی به صورت دست‌نخورده تهیه شد. این منطقه از سمت شمال به آجی‌چای از غرب به دشت تبریز و از جنوب به رواسان و از شرق به محله حکم‌آباد و شام‌غازان منتهی می‌شود. این محله در انتهای غربی تبریز و در داخل جلگه حاصلخیز تبریز کنار (آجی‌چای) واقع شده و قطب صنعتی و کشاورزی تبریز محسوب می‌شود. موقعیت جغرافیایی منطقه قراملک (محل نمونه‌برداری) واقع در شهر تبریز در شکل (۱) با رنگ سبز نشان داده شده است. برخی خصوصیات فیزیکی خاک مطابق جدول (۱) است.

2019). به موازات کاربرد و بررسی کارایی معادله کسری انتقال-پخش، تحقیقاتی هم در خصوص روش‌های حل معادله مذکور انجام گرفته است. چنانچه Wang و Barkai (2020) به‌منظور بررسی انتشار آلاینده در لایه‌های زمین‌شناسی، معادله FADE را جهت توصیف انتشار جانبدارانه پیشنهاد و بررسی نمودند. آنها علاوه بر انتشار و انتقال، پدیده جدیدی به نام شکست تقارن را معرفی کردند که بیشتر در سیستم‌های بی‌نظم وجود دارد. Sene (2021) معادله انتقال-پخش کسری که توسط کاپیتو لیویل^۱ تعمیم یافته را مطالعه و با استفاده از تبدیل آشفستگی هموتوبی لاپلاس p معادلات آن را حل کرد. Abeye و همکاران (2022) نیز معادله FADE را در حالت ناپایدار بررسی و با استفاده از هماهنگی طیفی لاگر و روش تفاضل محدود، آن را بسط دادند. همچنین Tajadodi (2020) رویکرد جدیدی برای حل معادله مذکور ارائه داد. او از مشتق آتانگانا-بالتانو^۲ به‌عنوان عملگر مشتق کسری استفاده کرد. مشتق کسری ذکر شده شامل تابع میتاگ-لفلر^۳ بوده که به‌عنوان هسته غیرمفرد و غیرمحلی است. شبیه‌سازی انتقال فلزات سنگین با توجه به خاصیت جذبی بسیار بالای آنها به‌خصوص در خاک‌های دارای بافت سنگین و طبیعی (دست‌نخورده)، با کمک مدل‌های رایج شبیه‌سازی مشکل بوده، بنابراین بررسی مدل‌های جایگزین موفق می‌تواند مفید باشد. علی‌رغم مطالعه‌های انجام گرفته، کارایی مدل FADE در غلظت‌های اولیه متفاوت فلزات سنگین بررسی نگردیده و تاثیر غلظت اولیه جرم بر رفتار انتقال آن مورد بحث می‌باشد. با توجه به اینکه کادمیوم جزو فلزات با تحرک بالا در خاک و آب زیرزمینی است و متاسفانه منطقه مورد مطالعه (آذربایجان شرقی) منبع آلودگی با عنصر



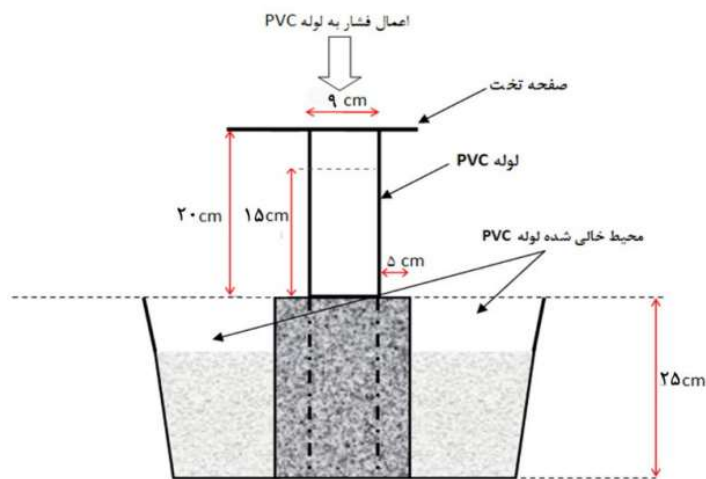
شکل ۱. موقعیت جغرافیایی منطقه قراملک (محل نمونه‌برداری) در شهر تبریز

1 Caputo-Liouville
2 Atangana-Baleanu
3 Mittag-Leffler

جدول ۱. خصوصیات فیزیکی خاک		
۴۳/۹	(%)	شن
۳۵/۱	(%)	سیلت
۲۱/۰	(%)	رس
بافت خاک		
۲/۱	(%)	ماده آلی
۷/۷		pH
۱/۴		pb
۲۰	(%)	ظرفیت زراعی
۱/۷	(dS/m)	هدایت الکتریکی
۲۰/۱	(%)	کلسیم کربنات
۱۹/۵۴	(%)	آهک

درون خاک همزمان با ورود لوله‌ها مرتباً خاک اطراف آنها حفاری و تخلیه شد. پس از پر شدن استوانه از خاک تا ارتفاع ۱۵ سانتی‌متری، دهانه لوله‌ها با توری پوشیده شد تا از ریزش خاک جلوگیری شود. سپس لوله‌های PVC همراه با خاک دست‌نخورده داخل آنها تا کف ستون‌ها کنده و بالا آورده شدند.

به‌منظور تهیه ستون‌های خاک دست‌نخورده لوله‌های پلی‌اتیلن (PVC) با قطر و ارتفاع به ترتیب ۱۰ و ۲۰ سانتی‌متر تهیه شد. جهت سهولت فروری لوله‌ها در خاک، لبه آنها از طرف خارج تیز شد و سپس لوله‌ها تا عمق ۱۵ سانتی‌متری به آرامی و با فشار دست وارد خاک شدند (شکل ۲). جهت نفوذ آسان‌تر لوله‌ها به

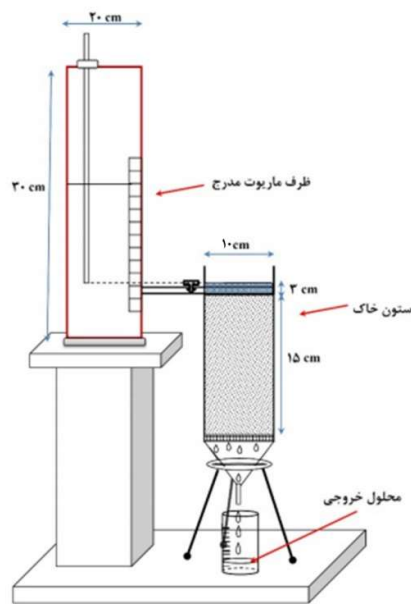


شکل ۲. نحوه فرو کردن لوله PVC جهت نمونه‌برداری خاک به صورت دست‌نخورده

خاک به‌منظور آب‌شویی با محلول ۰/۰۱ مولار CaCl_2 به‌عنوان محلول زمینه مطابق شکل (۳) به مخزن ماریوت وصل شدند. سرعت جریان برابر با سرعت جریان بافر (سانتی‌متر بر دقیقه ۰/۱۰۴) و ثابت بود. از مخزن مذکور جهت ابقای شدت جریان ثابت محلول بر ستون خاک استفاده شد. کف این ستون‌ها در داخل قیف پلاستیکی بر روی اسکاج و تور سیمی تثبیت شد (شکل ۳). نقش تور سیمی و اسکاج برای نگهداری و تحمل وزن ستون خاک و جلوگیری از شسته شدن احتمالی ذرات خاک از انتهای ستون خاک بود. منافذ تور سیمی و اسکاج روی آن به حد لازم درشت بودند تا محدودیتی برای جریان آب در ستون خاک ایجاد نکند.

جهت جلوگیری از وقوع جریان مستقیم محلول ردیاب از فضای بین دیواره ستون خاک و لوله PVC قبل از پر شدن لوله‌ها جدار داخلی آن‌ها با پارافین مذاب آغشته شد. لازم به ذکر است که تمامی آزمایش‌ها در سه تکرار انجام شد.

برای انجام آزمایش‌های جانمایی اختلاط‌پذیر، از روش ارایه شده توسط Shahmohammadi-Kalalagh و Beyrami (۲۰۱۵) استفاده شد. بدین منظور ابتدا ستون‌ها از قسمت پایین به تدریج با محلول زمینه ۰/۰۱ مولار CaCl_2 اشباع شدند. پس از اشباع نمودن، با استفاده از شست‌وشوهای متوالی با محلول زمینه اجازه داده شد تا خاک داخل ستون‌ها با محلول CaCl_2 به تعادل برسد. ستون‌های



شکل ۳. نمایی از ستون‌های خاک در طول رخنه محلول فلز سنگین

آزمایشگاه مورد استفاده قرار می‌گیرد. اساس تعیین غلظت عناصر در طیف‌سنج Atomic Absorption بر پایه اندازه‌گیری میزان جذب نور توسط اتم‌های آن عنصر استوار است. اسپکتروسکوپی جذب اتمی معمولاً در آزمایشگاه به منظور آنالیز فلزات سنگین موجود در آنالیت استفاده می‌شود. برای دستیابی به کنترل کیفیت قابل قبول (QC) و تضمین کیفیت (QA)، دستگاه جذب اتمی با استفاده از ۵ محلول استاندارد آبی با غلظت ۰، ۱۰، ۲۵، ۵۰ و ۱۰۰ میلی‌گرم بر لیتر تهیه شده با استفاده از آب مقطر اسیدی شده با اسیدنیتریک کالیبره شد. منحنی کالیبراسیون با $r^2 = ۰/۹۹۹۹$ - دست آمد و آزمایش‌ها در دمای اتاق (1 ± 22 درجه سانتی‌گراد) انجام شد.

تئوری مدل

رابطه کسری انتقال-پخش (FADE) برای جرم و آلاینده غیرواکنشگر در حالت یک بعدی می‌تواند به صورت زیر بیان شود (Benson, 1998):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{1}{2}(1 + \beta)D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{1}{2}(1 - \beta)D \frac{\partial^2 C}{\partial (-x)^2} \quad (۲)$$

R فاکتور تاخیر (بی‌بعد)؛ C غلظت جرم؛ v سرعت متوسط

آب منفذی؛ x جهت مکانی؛ t زمان؛ D ضریب پخش با بعد $[L^2 T^{-1}]$

؛ α درجه کسری دیفرانسیل و $2 > \alpha > 1$ است. در حالت $\alpha = 2$ ،

رابطه FADE به CDE تبدیل می‌شود. ($-1 \leq \beta \leq +1$) میزان

چولگی فرآیند انتقال (میزان انحراف پخش) را بیان می‌کند. وقتی

$\beta = 0$ باشد، جابه‌جایی ذرات جرم و پخش آنها در FADE متقارن

با قطع جریان محلول زمینه در هر تیمار بلافاصله محلول $CdCl_2$ به غلظت ۵۰، ۱۰۰ و ۱۵۰ میلی‌گرم در لیتر (C_0) در هر یک از تیمارها با استفاده از یک ظرف ماریوت دیگر (با شدت جریان ثابت برابر محلول زمینه) به ستون‌ها اعمال شد. زه‌آب خروجی بلافاصله بعد از تزریق محلول مورد نظر از هر ستون در زمان‌های ۵-۱۵ دقیقه جمع‌آوری و غلظت فلز سنگین مورد نظر (C) در آن اندازه‌گیری شد. این عمل تا زمان رسیدن به غلظت ثابت فلز سنگین کادمیوم در زه‌آب خروجی ادامه یافت. غلظت‌های اندازه‌گیری شده تبدیل به غلظت نسبی (C/C_0) شد و منحنی‌های رخنه از ترسیم (C/C_0) در مقابل زمان تجمعی (t) و یا حجم منفذی (P_v) به دست آمد. هر حجم منفذی (P_v) عبارت از حجم کل منافذ اشغال شده توسط سیال در ستون خاک بود و از رابطه (۱) محاسبه شد.

$$P_v = \theta_s \times V_t(۱)$$

در رابطه مذکور P_v برحسب (سانتی‌مترمکعب)، θ رطوبت

اشباع حجمی (سانتی‌مترمکعب بر سانتی‌مترمکعب) و V_t حجم

ستون خاک (سانتی‌مترمکعب) است. تعداد حجم منفذی از تقسیم

محلول خروجی به P_v به دست آمد. غلظت فلز سنگین Cd در

محلول خروجی با استفاده از دستگاه جذب اتمی در سه تکرار

برای هر غلظت اولیه (مجموع ۹ نمونه) توسط دستگاه جذب اتمی

(شیمادزو-AA6300) اندازه‌گیری شد. دستگاه جذب اتمی از

تجهیزات آنالیتیکالی است که برای آنالیز دامنه وسیعی از فلزات در

مدل‌ها فراهم می‌آوردند. بر اساس نظریه Legates و Mc Cabe (1999) استفاده از نمایه‌های متکی بر همبستگی بین داده‌های مشاهداتی و محاسباتی، نظیر ضریب همبستگی، به تنهایی نمی‌تواند در تحلیل دقت مدل‌ها کارآمد باشد. بنابراین از نمایه‌های دیگری نیز در این خصوص بایستی بهره جست. در این پژوهش از شاخص‌های آماری ضریب تبیین^۲ (r^2)، جذر میانگین مربعات خطا^۳ (RMSE)، بازده یا کارایی مدل^۴ (EF) و ضریب مقادیر باقی‌مانده^۵ (CRM) به منظور بررسی و ارزیابی دقت مدل‌ها استفاده شد. شاخص‌های یاد شده به ترتیب با استفاده از روابط زیر قابل محاسبه می‌باشند.

$$r^2 = \frac{(\sum_{i=1}^n (P_i - \bar{P}_i)(O_i - \bar{O}_i))^2}{\sum_{i=1}^n (P_i - \bar{P}_i)^2 \sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O}_i)^2} \quad \text{رابطه (۶)}$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (P_i - O_i)^2} \quad \text{رابطه (۷)}$$

$$EF = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (P_i - O_i)^2}{\sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O}_i)^2} \quad \text{رابطه (۸)}$$

$$CRM = \frac{\sum_{i=1}^n O_i - \sum_{i=1}^n P_i}{\sum_{i=1}^n O_i} \quad \text{رابطه (۹)}$$

علایم و عوامل به کار رفته در روابط فوق دارای معنی و مفهوم

زیر می‌باشند:

P_i مقادیر برآورد یا همان‌سازی شده؛ O_i مقادیر مشاهده‌ای (اندازه‌گیری شده)؛ \bar{P}_i و \bar{O}_i به ترتیب میانگین مقادیر برآورد شده و اندازه‌گیری شده و n تعداد نمونه‌ها (رقم‌های مشاهده، محاسبه و یا برآورد شده) است.

نتایج

پارامترهای به دست آمده از شبیه‌سازی انتقال فلز کادمیوم در سه غلظت اولیه ۵۰، ۱۰۰ و ۱۵۰ (میلی‌گرم بر لیتر) در خاک لومی توسط مدل FADE به شرح جدول (۲) است. پارامتر درجه کسری به دست آمده برای انتقال فلز کادمیوم در $C_0=100$ میلی‌گرم بر لیتر کمترین مقدار (۱/۶۶) و در غلظت $C_0=150$ میلی‌گرم بر لیتر بیشترین مقدار (۱/۷۲) را دارد. اما تغییرات درجه کسری به دست آمده بسیار کوچک و قابل چشم‌پوشی است. در حقیقت مقدار α در هر سه غلظت اولیه تقریباً برابر ۱/۷ است که با افزایش غلظت اولیه روند خاصی نداشته و به نظر می‌رسد تغییر غلظت اولیه تاثیری بر این پارامتر ندارد. همچنین مقدار α در این مطالعه همواره کوچک‌تر از عدد ۲ بود که بیانگر انتقال نامتعارف Cd در ستون خاک لومی است.

است (Gao et al., 2009). نشان داده شده است که FADE می‌تواند روش مناسب برای بیان انتقال جرم در محیط‌های غیرهمگن باشد. برای انتقال یک بعدی و در حالت ماندگار با تزریق ورودی به صورت مرحله‌ای، حل تحلیل رابطه FADE متقارن، به صورت زیر بیان می‌شود (Pechepsky et al., 2000; Huang et al., 2006):

$$C(x, t) = C_0 \left[1 - F_\alpha \left(\frac{x - Vt/R}{\left(\frac{\cos(\frac{\pi\alpha}{2})}{2} \right)^{1/\alpha} Dt/R} \right) \right] \quad \text{رابطه (۳)}$$

که در آن

$$F_\alpha(y) = 1 - \frac{1}{2} \int_0^1 \exp \left[-y^{\alpha-1} U_\alpha(\varphi) \right] d\varphi \quad \text{رابطه (۴)}$$

و

$$U_\alpha(\varphi) = \left[\frac{\sin(\frac{\pi\alpha\varphi}{2})}{\cos(\frac{\pi\varphi}{2})} \right]^{\alpha/1-\alpha} \quad \text{رابطه (۵)}$$

در رابطه (۴)، تابع $F_\alpha(y)$ به تابع احتمال مقرون استاندارد

(توزیع لوی) موسوم بوده و به روش عددی قابل محاسبه است.

تخمین و برآورد پارامترها

در تحقیق حاضر پارامترهای انتقال از طریق روش مدل‌سازی معکوس محاسبه شد. در این روش علاوه بر داده‌های اندازه‌گیری شده (غلظت کادمیوم)، به یک مدل ریاضی مناسب که بیان‌کننده روابط حاکم بر پدیده باشد و یک الگوریتم بهینه‌سازی^۱ برای مینیمم کردن یک تابع هدف نیاز بود. مقدار تابع هدف بیانگر اختلاف بین مقادیر اندازه‌گیری و شبیه‌سازی شده توسط مدل مورد استفاده است. مدل‌های مختلفی بر اساس روش معکوس توسعه یافته‌اند، مدلهایی همچون HYDRUS-1D (Simunek et al., 1998)، HYDRUS-2D (Simunek et al., 1999) و CXTFIT2.1 (Van Genuchten, 1981) برای تعیین ویژگی‌های هیدرولیکی و انتقال املاح در حالت یک و دو بعدی استفاده می‌شوند. در مطالعه حاضر برای شبیه‌سازی مدل FADE از کد FADEMAIN Fortran (Huang et al., 2006) جهت برازش منحنی BTC و برآورد پارامترهای D ، R و α استفاده شد.

معیار ارزیابی مدل

معیارهای آماری برای قضاوت کیفی روی مدل‌ها استفاده می‌شوند. این معیارها روش هدفمندی را برای ارزیابی عملکرد

1 Optimization algorithm
2 Coefficient of determination
3 Root Mean Square Error

4 Modelindg Efficiency
5 Coefficient of Residual Mass

بررسی انتقال کادمیوم در خاک لومی دست نخورده با مدل FADE/۸۵

جدول ۲. پارامترهای برآورد شده در شبیه‌سازی انتقال فلز کادمیوم در خاک لومی دست نخورده توسط مدل FADE

فلز سنگین	ستون خاک	غلظت اولیه (mg/l)	FADE		
			D (cm ² /min)	α	R
Cd	دست نخورده	۵۰	۰/۰۰۱۵۶	۱/۷	۱۱/۷
		۱۰۰	۰/۰۰۱۷۳	۱/۶۶	۱۰
		۱۵۰	۰/۰۰۳۶۱	۱/۷۲	۸/۳

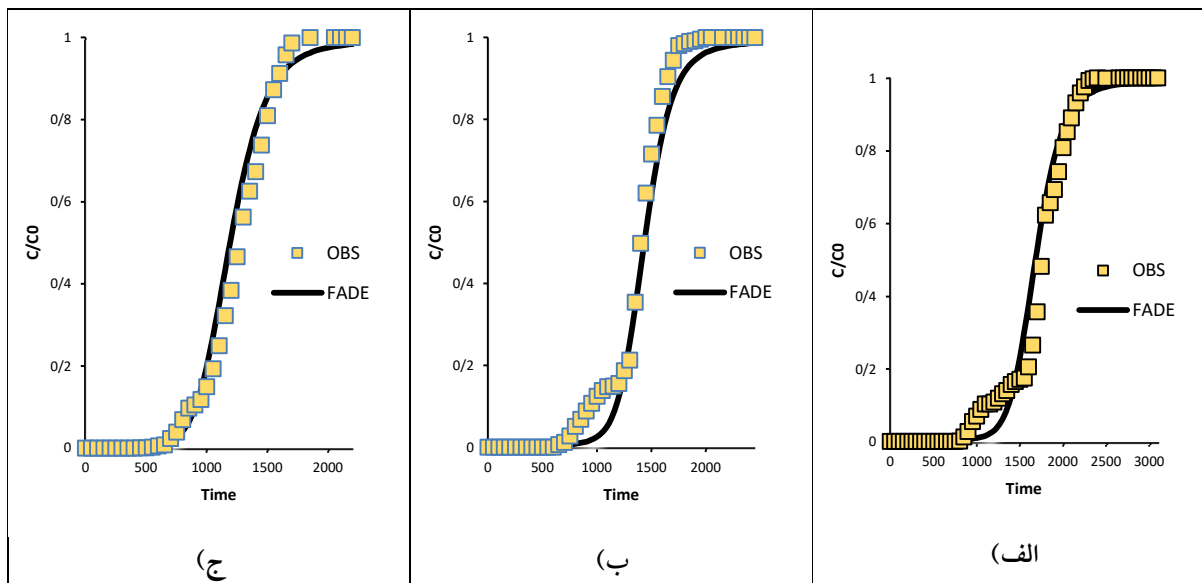
شبیه‌سازی کرده است. مشخص است در قسمت انتهایی منحنی‌های رخنه برازش داده شده توسط مدل و داده‌های اندازه‌گیری شده تقریباً بر هم منطبق می‌باشند. به نظر می‌رسد که BTC حاصله از شبیه‌سازی مدل مذکور و BTC حاصل از داده‌های تجربی در غلظت اولیه ۱۵۰ (میلی‌گرم بر لیتر) انطباق بیشتری دارند (شکل ۴). به عبارت دیگر کارایی مدل FADE با افزایش C₀ به‌طور بسیار جزئی افزایش یافته است. مدت زمان آزمایش با افزایش غلظت اولیه کاهش یافته است، بنابراین می‌توان نتیجه گرفت مدت زمان رسیدن به تعادل به غلظت اولیه فلز بستگی دارد. با توجه به شکل (۴) منحنی‌های برازش داده شده توسط مدل مذکور در غلظت اولیه ۵۰ و ۱۵۰ (میلی‌گرم بر لیتر) به‌صورت جزئی پایین‌تر از منحنی رخنه حاصله از مقادیر آزمایشگاهی است که نشان‌دهنده پیش‌بینی کمتر غلظت فلز کادمیوم نسبت به غلظت اندازه‌گیری شده است. در صورتی که در C₀=100 میلی‌گرم بر لیتر منحنی رخته بالاتر از BTC به‌دست آمده از داده‌های تجربی است (شکل ۴).

با توجه به جدول (۲) ضریب پخش (D) برآورد شده توسط مدل FADE با افزایش غلظت بیشتر می‌شود. تغییرات مثبت مقدار D در غلظت اولیه ۱۵۰ (میلی‌گرم بر لیتر) بیشتر از صد در صد است. درحالی‌که این تغییرات در غلظت اولیه ۱۰۰ (میلی‌گرم بر لیتر) تقریباً ده درصد است. اگرچه روند تغییرات ضریب پخش با افزایش C₀ قابل پیش‌بینی نیست، اما رابطه مستقیم D با غلظت اولیه کاملاً مشهود و بیانگر افزایش فرآیند پخشیدگی در انتقال فلز کادمیوم در خاک لومی با افزایش غلظت اولیه آن می‌باشد (عباسی، ۱۳۹۲).

فاکتور تاخیر فلز Cd برآورد شده توسط مدل FADE در سه غلظت ۵۰، ۱۰۰ و ۱۵۰ (میلی‌گرم بر لیتر) به‌ترتیب ۱۱/۷، ۱۰ و ۸/۳ به‌دست آمد (جدول ۲).

ارزیابی مدل بر اساس منحنی رخنه

به‌منظور مقایسه بهتر منحنی‌های رخنه داده‌های مشاهداتی با نتایج شبیه‌سازی مدل مذکور در غلظت‌های ۵۰، ۱۰۰ و ۱۵۰ (میلی‌گرم بر لیتر) در شکل (۴) ارایه شد. با توجه به این نمودارها، مدل FADE انتقال فلز کادمیوم در خاک را به خوبی



شکل ۴. مقایسه شبیه‌سازی انتقال فلز کادمیوم توسط مدل FADE با داده‌های اندازه‌گیری شده در خاک لومی دست‌نخورده: (الف) غلظت اولیه ۵۰ (میلی‌گرم بر لیتر)، (ب) غلظت اولیه ۱۰۰ (میلی‌گرم بر لیتر) و (ج) غلظت اولیه ۱۵۰ (میلی‌گرم بر لیتر)

ارزیابی مدل بر اساس شاخص‌های آماری

نتایج ارزیابی کمی مدل FADE در شبیه‌سازی انتقال Cd در خاک در سه غلظت اولیه در جدول (۳) ارائه شده است. مقادیر ضریب تبیین (R^2) و بازده مدل (EF) برابر با ۰/۹۸ است که نشان‌دهنده قابلیت مدل FADE در شبیه‌سازی انتقال فلز کادمیوم در خاک لومی می‌باشد. شاخص جذر میانگین مربعات خطا (RMSE) هر چه کوچک‌تر باشد، بیانگر کارایی بیشتر مدل است که در این تحقیق مقدار آن برابر با ۰/۰۵ است. با توجه به جدول (۳) افزایش غلظت اولیه فلز کادمیوم باعث تغییرات

قابل مشاهده‌ای در عملکرد مدل نشده است. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت غلظت اولیه فلز سنگین Cd در شبیه‌سازی انتقال آن توسط مدل کسری انتقال-پخش اثر آنچنانی ندارد، اما با این حال افزایش C_0 باعث افزایش جزئی کارایی مدل می‌شود که نمودار (۴) نیز موید این موضوع هستند. شاید دلیل آن عدم تاثیر غلظت اولیه بر پارامتر اصلی مدل FADE یعنی پارامتر درجه کسری (α) است. مقادیر مثبت و منفی CRM نشان می‌دهد نتایج مدل‌سازی بزرگ‌تر یا کوچک‌تر از داده‌های مشاهداتی است (جدول ۳).

جدول ۳. ارزیابی مدل FADE در شبیه‌سازی انتقال فلز کادمیوم در خاک لومی با استفاده از شاخص‌های آماری

فلز سنگین	ستون خاک	غلظت اولیه (mg/l)	R^2	RMSE	EF	CRM
		۵۰	۰/۹۸۲۷۰۷	۰/۰۵۷۷۴۳	۰/۹۸۲۳۷۴	-۰/۰۰۷
Cd	دست نخورده	۱۰۰	۰/۹۹۳۰۵۴	۰/۰۵۲۲۵۵	۰/۹۸۵۸۵۵	۰/۰۸۱۴۶۳
		۱۵۰	۰/۹۸۶۴۶۹	۰/۰۵۱۳۵۵	۰/۹۸۵۴۱۳	-۰/۰۳۱۳

بحث و نتیجه‌گیری

در این پژوهش، انتقال فلز کادمیوم در سه غلظت اولیه ۵۰، ۱۰۰ و ۱۵۰ (میلی‌گرم بر لیتر) در خاک لومی دست‌نخورده شبیه‌سازی گردید. نتایج حاصل از شبیه‌سازی برازش و با منحنی‌های رخنه داده‌های مشاهداتی مقایسه گردید. همچنین به منظور بررسی دقیق کارایی مدل از تحلیل آماری نیز استفاده شد. جهت برآورد برخی پارامترهای انتقال از مدل‌سازی معکوس استفاده گردید. منحنی‌های برازش داده شده توسط مدل مذکور و داده‌های آزمایشگاهی تقریباً بر یکدیگر منطبق بود که نشانگر عملکرد بسیار خوب مدل FADE است. مقادیر $R^2=0/98$ و $RMSE=0/05$ نیز موید این موضوع بود. همان‌طور که پیش‌تر اشاره شد، تحقیقات بسیاری از جمله Xu و همکاران (2022) بیانگر کارایی مدل FADE در انتقال نامتعارف املاح در خاک بودند. دلیل آن وجود پارامتر درجه کسری است که معادله انتقال را متعادل‌تر می‌کند (Kelly & Meerschaert, 2019). در مورد تاثیر غلظت اولیه در عملکرد مدل نمی‌توان نظر قطعی داد، اما افزایش آن به صورت جزئی باعث افزایش کارایی مدل می‌شود. مدت زمان آزمایش با افزایش غلظت اولیه کاهش می‌یابد که نشان‌دهنده تسریع تعادل بین غلظت ورودی و خروجی در آزمایش است. به عبارت دیگر زمانی که غلظت اولیه کادمیوم بیشتر می‌شود، فرآیند جذب کاهش یافته و حرکت املاح در خاک تسریع می‌شود (عباسی، ۱۳۹۲). پارامتر

درجه کسری (α) به دست آمده توسط مدل FADE برای فلز Cd تقریباً برابر با ۱/۷ به دست آمد که بیانگر انتقال نامتعارف و نامتعارف فلز کادمیوم در ستون‌های خاک لومی است. نتایج پژوهش حاضر با یافته‌های Mohammadi و Mehdinejadiani (2021)، Moradi و Mehdinejadiani (2018) و شاه‌محمدی کلالق و همکاران (۱۳۹۳) مبنی بر نامتعارف بودن انتقال در خاک ناهمگن در یک راستا است، زیرا که مقدار α به دست آمده در تحقیق ایشان تقریباً برابر با ۱/۷ است. در حقیقت مقدار درجه کسری (α) در مدل FADE نشان‌دهنده رفتار نامتعارف انتقال است ($0 < \alpha < 1$). به عبارت دیگر هرچه α به عدد یک نزدیک‌تر شود، انتقال نامتعارف بوده و اگر به عدد دو میل کند انتقال معمولی است. در واقع زمانی که α برابر با عدد ۲ می‌باشد، معادله انتقال-پخش کسری (FADE) به مدل انتقال-پخش کلاسیک (CDE) تبدیل شده و شدت پخشیدگی املاح در خاک با شیب غلظت رابطه خطی دارد.

تغییرات α به دست آمده از مدل با تغییرات C_0 قابل اغماض بوده و به نظر می‌رسد از غلظت اولیه تاثیر نمی‌پذیرد. با افزایش غلظت اولیه، فرآیند پخشیدگی در انتقال فلز کادمیوم افزایش یافته و روند آن غیرخطی و غیرقابل پیش‌بینی است. Shahmohammadi و Kalalagh و Taran (2019) نیز در پژوهشی تاثیر غلظت اولیه بر حرکت فلز سنگین روی را مشابه تحقیق حاضر عنوان کردند.

- equation. Arab Journal of Basic and Applied Sciences, 29(1): 77-85.
DOI: 10.1080/25765299.2022.2064076/
- Benson, D.A. (1998) The fractional advection-dispersion equation: Development and application, Ph.D. Dissertation, University of Nevada Reno, 1-157.
- Benson, D.A., Schumer, R., Meerschaert, M.M. and Wheatcraft, S.W. (2001) Fractional dispersion, Lévy motion, and the MADE tracer tests. Transport in Porous Media, 42: 211-240. Retrieved from <https://doi.org/10.1023/A:1006733002131/>
- Benson, D.A., Tadjeran, C., Meerschaert, M.M., Farnham, I. and Pohl, G. (2004) Radial fractional-order dispersion through fractured rock. Water Resources Research, 40(Art): W12416. Retrieved from <https://doi.org/10.1029/2004WR003314/>
- Benson, D.A., Wheatcraft, S.W. and Meerschaert, M.M. (2000a) Application of fractional advection-dispersion equation. Water Resource Research, 36(6): 1403-1412. Retrieved from <https://doi.org/10.1029/2000WR900031/>
- Benson, D.A., Wheatcraft, S.W. and Meerschaert, M.M. (2000b) The fractional – order governing equation of Levy motion. Water Resource Research, 36(6): 1413-1423. Retrieved from <https://doi.org/10.1029/2000WR900032/>
- Berkowitz, B. and Scher, H. (1995) On characterization of anomalous dispersion in porous and fractured media. Water Resources Research. 31(6): 1461-1466. Retrieved from <https://doi.org/10.1029/95WR00483/>
- Berkowitz, B. and Scher, H. (1997) Anomalous transport in random fracture networks, Physical Review Letters, 79(20), 4038-4041. Retrieved from <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.79.4038/>
- Berkowitz, B. and Scher, H. (2009) Exploring the nature of non-fickian transport in laboratory experiments. Advances in Water Resources, 32(5): 750-755. DOI: 10.1016/j.advwatres.2008.05.004/
- Berkowitz, B., Emmanuel, S. and Scher, H. (2008) Non-Fickian Transport and Multiplerate Mass Transfer in Porous Media. Water Resources Research. 44(3): W03402. Retrieved from <https://doi.org/10.1029/2007WR005906/>
- Bolster, D., Benson, D. A., Le Borgne, T. and Dentz, M. (2010) Anomalous mixing and reaction induced by superdiffusive nonlocal transport. Physical Review E, 82(2): 021119. Retrieved from <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.82.021119/>

در واقع فرآیند غالب در حرکت فلز سنگین، به انتقال توده‌ای در غلظت اولیه کمتر و به انتقال پخشیدگی در غلظت‌های بیشتر تمایل دارد. به عبارت دیگر، در غلظت‌های کمتر، فرآیند توده‌ای نقش مهمی در انتقال دارد و با افزایش غلظت‌های اولیه، نقش فرآیند پخشیدگی و انتشار پرننگ‌تر می‌شود. همچنین ضریب پخش (D) تخمین‌زده شده توسط مدل FADE به‌طور قابل توجهی کوچک است. این تفاوت قابل توجه را می‌توان به پارامتر درجه کسری (α) در مدل FADE ربط داد، زیرا در این مدل ضریب پخش با α ($1 < \alpha < 2$) با ضریب پخش با توان ۲ در رابطه CDE متناسب است ($D_{FADE}^{\alpha} \equiv D_{Other models}^2$). در حقیقت پارامتر درجه کسری (α) تغییرات ضریب پخشیدگی مدل را متعادل می‌کند (Huang et al., 2006). رابطه فاکتور تاخیر با غلظت اولیه معکوس و خطی است و مشابه نتایج تحقیق Taran و Shahmohammadi-Kalalagh (2019) می‌باشد. با توجه به اینکه فاکتور تاخیر (R) بیانگر فرآیند جذب در خاک است، Tiwari و همکاران (2007) معتقد بودند با افزایش غلظت، جذب به تدریج کاهش یافته و روند آن غیرخطی و غیرقابل پیش‌بینی است. دلیل آن می‌تواند ناشی از رقابت در تصاحب سایت‌های خالی جذب توسط فلزات سنگین باشد. در غلظت اولیه پایین، نسبت سایت‌های خالی جذب برای فلزات سنگین زیاد است، در نتیجه جذب به میزان قابل توجهی بیشتر می‌شود. درحالی‌که در غلظت اولیه بیشتر، میزان جذب به علت انباشت یون‌های فلزی در سایت‌های جذب خالی کاهش می‌یابد.

منابع

- شاه‌محمدی‌کلانق، ش. (۱۳۹۰) شبیه‌سازی انتقال فلزات سنگین در محیط‌های متخلخل غیراشباع با رابطه کسری انتقال-پخش. پایان‌نامه دکتری رشته آبیاری و زهکشی، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد علوم و تحقیقات، تهران، ۱۴۳ صفحه.
- شاه‌محمدی‌کلانق، ش.، بابازاده، ح. و بهاری، س. (۱۳۹۳) مقایسه دو مدل برای انتقال برمایند در ستون‌های خاک دست‌نخورده با مدل کسری انتقال-پخش. مجله پژوهش‌های خاک، علوم خاک و آب، ۲۸(۱): ۷۷-۸۶.
- عباسی، ف. (۱۳۹۲) فیزیک خاک پیشرفته. تهران: موسسه انتشارات و چاپ دانشگاه تهران، چاپ دوم، ۳۲۰ صفحه.
- Abeye, N., Ayalew, M., Suthar, D.L., Purohit, S.D. and Jangid, K. (2022) Numerical solution of unsteady state fractional advection-dispersion

- Resources Research, 35(1): 233-241. Retrieved from <https://doi.org/10.1029/1998WR900018/>
- Mohammadi, B. and Mehdinejadani, B. (2021) Numerical simulation of solute transport in saturated porous media with bounded domains. The Groundwater Association, 59(6): 892-904. Retrieved from <https://doi.org/10.1111/gwat.13118/>
- Moradi, G. and Mehdinejadani, B. (2018) Modelling solute transport in homogeneous and heterogeneous porous media using spatial fractional advection-dispersion equation. Soil and Water Research, 13(1): 18-28. DOI: 10.17221/245/2016-SWR/
- Moradi, G. and Mehdinejadani, B. (2020) An experimental study on scale dependency of fractional dispersion coefficient. Arabian Journal of Geosciences, 13(11): 1-13. Retrieved from <https://doi.org/10.1007/s12517-020-05438-z/>
- Pechepsky, Y., Benon, D. and Rawls, W. (2000) Simulating scale-dependent solute transport in soils with the fractional advective- dispersive equation. Soil Science Society of America Journal, 64(3): 1234-1243. Retrieved from <https://doi.org/10.2136/sssaj2000.6441234x/>
- Sene, N. (2021) Fractional advection-dispersion equation described by the Caputo left generalized fractional derivative - Palestine Journal of Mathematics, 10(2): 562-579. Retrieved from <http://pjm.ppu.edu/>
- Shahmohammadi-Kalalagh, S. and Taran, F. (2019) Effect of initial concentration and input flux on equilibrium and non-equilibrium transport of Zn in soil columns. International Journal of Environmental Science and Technology, 16: 7565-7572. Retrieved from <https://doi.org/10.1007/s13762-018-2159-z/>
- Shahmohammadi-Kalalagh, Sh. and Beyrami, H. (2015) Modeling bromide transport in undisturbed soil columns with the continuous time random walk. Geotechnical and Geological Engineering, 33: 1511-1518. Retrieved from <https://doi.org/10.1007/s10706-015-9917-1/>
- Shahmohammadi-Kalalagh, Sh., Babazadeh, H., Nazemi, A.H. and Manshoury, M. (2011) Isotherm and kinetic studies on adsorption of Pb, Zn and Cu by kaolinite. Caspian Journal of Environmental Sciences, 9(2): 243-255. Retrieved from <https://cjes.guilan.ac.ir/>
- Sharma, P.K., Agarwal, P. and Mehdinejadani, B. (2020) Study on non-fickian behavior for solute transport through porous media. Journal of Hydraulic Engineering, 28(1): 171-179.
- Simunek, J., Sejna, M. and van Genuchten M.T. (1998) The HYDRUS-1D software package for Bolster, D., Benson, D.A., Meerschaert, M.M. and Baeumer, B. (2013) Mixing-driven equilibrium reactions in multidimensional fractional advection-dispersion systems. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 392(10): 2513-2525. Retrieved from <https://doi.org/10.1016/j.physa.2012.12.040/>
- Bond, W.J. and Wierenga, P.J. (1990) Immobile water during solute transport in unsaturated sand columns. Water Resources Research, 26(10): 2475-2481. Retrieved from <https://doi.org/10.1029/WR026i010p02475/>
- Chang, F.X., Chen, J. and Huang, W. (2005) Anomalous diffusion and fractional advection-diffusion equation. Acta Physica Sinica. SINICA, 54(3): 1113-1117. Retrieved from <https://doi.org/10.7498/aps.54.1113/>
- Deng, Z., Singh, V.P. and Bengtsson L. (2004) Numerical solution of fractional advection-dispersion equation. Journal of Hydraulic Engineering, 130(5): 422-431. Retrieved from [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9429\(2004\)130:5\(422\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9429(2004)130:5(422))
- Gao, F., Zhan, H., Feng, Sh., Huang, G. and Mao, X. (2009) Comparison of alternative models for simulating anomalous solute transport in a large heterogeneous soil column. Journal of Hydrology, 377(3-4): 391-404. Retrieved from <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2009.08.036/>
- Huang, G., Huang, Q. and Zhan, H. (2006) Evidence of one-dimensional scale-dependent fractional advection-dispersion. Journal of Contaminant Hydrology, 85(1-2): 53-71. Retrieved from <https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2005.12.007/>
- Huang, G., Huang, Q., Zhan, H., Chen, J., Xiong, Y. and Feng, S. (2005) Modeling containment transport in homogeneous porous media with fractional advection- Dispersion equation. Science in China Ser. D Earth sciences. 48: 295-302. Retrieved from <https://doi.org/10.1360/05yd0001/>
- Jury, W.A. (1982) Simulate of solute transport using a transfer function model. Water Resources Research, 18: 363-368. Retrieved from <https://doi.org/10.1029/WR018i002p00363/>
- Kelly, J. and Meerschaert, M. (2019) The fractional advection-dispersion equation for contaminant transport. In V. Tarasov (Ed.), Volume 5 Applications in Physics, Part B (pp. 129-150). Berlin, Boston: De Gruyter. Retrieved from <https://doi.org/10.1515/9783110571721-006/>
- Legates, D.R. and Mc Cabe, G.J. (1999) Evaluating the use of goodness - of - fit measures in hydrologic and hydroclimatic validation. Water

- Physical Review Letters, 125: 240606. Retrieved from <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.125.240606/>
- Xu, Y., Sun, H., Qiao, C. and Qian, J. (2022) Non-Fickian transport of sodium chloride in inter-river land: experiment validation and fractional derivative modeling. *European Physical Journal*, 137(11): 1275-1275. Retrieved from <https://doi.org/10.1140/epjp/s13360-022-03498-6/>
- Zaheer, M., Wen, Zh., Zhan, H., Chen, X. and Jin, M. (2017) An experimental study on solute transport in one-dimensional clay soil columns. *Geofluids*, 2017(1): 1-17. Retrieved from <https://doi.org/10.1155/2017/6390607/>
- Zhang, Y. and Benson, D. (2008) Lagrangian simulation of multidimensional anomalous transport at the MADE site. *Geophysical Research Letters*, 35: L07403. Retrieved from <https://doi.org/10.1029/2008GL033222/>
- Zhang, Y., Benson, D.A., Meerschaert, M.M. and LaBolle, E.M. (2007) Space- fractional advection-dispersion equations with variable parameters: Diverse formulas, numerical solutions, and application to the Macro dispersion Experiment site data. *Water Resources Research*, 43: W05439. Retrieved from <https://doi.org/10.1029/2006WR004912/>
- Zhi-Ming, Q.I., Shao-Yuan, F. and Helmers, M.J. (2012) Modeling cadmium transport in neutral and alkaline soil columns at various depths. *Pedosphere*, 22(3): 273-282. Retrieved from [https://doi.org/10.1016/S1002-0160\(12\)60014-9/](https://doi.org/10.1016/S1002-0160(12)60014-9/)
- simulating the one-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably-saturated media. U.S. Salinity Laboratory, Riverside, California.
- Simunek, J., Sejna, M. and van Genuchten M.T. (1999) The HYDRUS-2D software package. International Ground Water Modeling Center.
- Sun, L, Qiu, H, Wu, C, Niu, J, Hu, BX. (2020) A review of applications of fractional advection–dispersion equations for anomalous solute transport in surface and subsurface water. *WIREs Water*, 7(4): e1448. Retrieved from <https://doi.org/10.1002/wat2.1448/>
- Tajadodi, H. (2020) A numerical approach of fractional advection-diffusion equation with Atangana–Baleanu derivative, *Chaos, Solitons and Fractals*, 130: 109527. Retrieved from <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2019.109527/>
- Tiwari, P.R., Bala Ramudha, P., Srivastava, R.K. and Gupta, M.K. (2007) Sorption and desorption studies of metallic zinc on an alluvial soil. *Iranian Journal of Environmental Health Science and Engineering*, 4(3): 139-146.
- Van Genuchten, M. (1981) Non-Equilibrium transport parameters from miscible displacement experiments. Research Report, 119.
- Van Genuchten, M.T. and Wierenga, P.J. (1977) Mass transfer studies in sorbing porous media: II. Experimental evaluation with tritium (3H2O). *Soil Science Society of America Journal*, 41(2): 272–278. Retrieved from <https://doi.org/10.2136/sssaj1977.03615995004100020022x/>
- Wang, W. and Barkai, E. (2020) Fractional advection-diffusion-asymmetry equation.

Study of Cd transport in undisturbed loamy soil with the FADE model

Samira Morsali¹, Hossein Babazadeh^{2*}, Shahram Shahmohammadi-Kalalagh³ and Hossein Sedghi²

- 1) PhD Candidate of Irrigation and Drainage, Department of Water Sciences and Engineering, Science and Research Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran.
- 2) Professor, Department of Water Sciences and Engineering, Science and Research Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran.
*Corresponding Author Email Address: h_babazadeh@srbiau.ac.ir
- 3) Associate Professor, Department of Water Sciences and Engineering, Tabriz Branch, Islamic Azad University, Tabriz, Iran.

Date of Submission: 2023/05/23

Date of Acceptance: 2023/08/21

Abstract

Accurate expression of the solute transport in porous media is critical for evaluating and remediating pollutants in soils and aquifers. An important aspect of the transport of solutes and pollutants is the use of appropriate models to describe their transport behavior. In this study, the concentration of the heavy metal cadmium in the column of undisturbed loamy soil was measured using the miscible displacement experiment. This experiment was repeated in three initial concentrations (50, 100, and 150 mg/L). Then, Cd metal transport was simulated by fractional advection-dispersion equation (FADE). The breakthrough curves obtained from the simulation of FADE and the results of the experiments were fitted and the effect of C_0 on its performance was investigated. The order of fractional differentiation (α), dispersion coefficient (D) and retardation factor (R) in all three initial concentrations were estimated and compared using the inverse modeling. The results showed that the FADE model simulates cadmium transport well with $r^2=0.98$ and $RMSE=0.05$. The comparison of BTSs fitted by the FADE model and the observed laboratory data also confirms this issue. The order of fractional differentiation (α) obtained by the FADE model for Cd was almost the same and equal to 1.7, which indicated the anomalous and non-Fickian transport of cadmium metal in loamy soil columns. It seems that the lack of effect of C_0 on α , which is the main parameter of the FADE model, has caused the performance of FADE to have no special trend with the changes of C_0 and can be ignored. The hydrodynamic dispersion coefficient in the transport of Cd was increased by increasing C_0 and its process is non-linear and unpredictable and the relationship between R and initial concentration is inverse.

Keywords: Cadmium, Fractional advection-dispersion, FADE, Initial concentration, Metal transport.