# شبیه سازی حرکت کادمیم در خاک

**محمد علی محمودی، مهدی شرفا و غلامرضا ثواقبی**

به ترتیب دانشجوی کارشناسی ارشد خاک شناسی و استادیاران گروه خاک شناسی دانشگاه تهران

## مقدمه

در سال های اخیر مساله آلوده شدن آب های زیر زمینی به وسیله فلزات سنگین توجه زیادی را به خود جلب کرده است. به منظور حفاظت از آبهای زیر زمینی بایستی بتوان حرکت فلزات سنگین را در خاک پیشگویی کرد. پیشگویی آلودگی بالقوه آب های زیر زمینی از نظر بهداشتی بسیار مورد توجه است؛ و همچنین برای پاکسازی مکان های آلوده به این فلزات نیز ضروری است. هدف از این مطالعه توصیف حرکت کادمیم در خاک است.

## مدل انتقال

به منظور توصیف حرکت کادمیم در پروفیل خاک، برای حالت یک بعدی و جریان آب یکنواخت، از معادله معمول پخشیدگی- پراکنشی استفاده گردید (لاپیدوس و آموندسن۱۹۵۲). برای توصیف جذب کادمیم در خاک از مدل دو مکانی سینتیکی – تعادلی که توسط سلیم و همکاران (۱۹۸۱ ) ارائه شده است، استفاده شد. واکنش های برگشت ناپذیر مانند رسوب / انحلال، معدنی شدن و ساکن شدن نیز به صورت یک فرایند سینتیکی مرتبه اول بیان می شود (آماچر و همکاران ۱۹۸۸ ).بر این مدل انتقال کادمیم در خاک به صورت زیر بیان می گردد:

$$\frac{\partial C}{\partial t}+\frac{\rho}{\theta}\frac{\partial S}{\partial t}=D\frac{\partial^2 S}{\partial z^2}-v\frac{\partial C}{\partial z}-Q \qquad (۱)$$

$$S=S_e+S_k \qquad (۲)$$

$$S_e=k_d C^b \qquad (۳)$$

$$\frac{\partial S_k}{\partial t}=k_1\left(\frac{\theta}{\rho}\right)C^n-k_2 S_k \qquad (۴)$$

$$Q=\rho\frac{\partial S}{\partial t}=\theta.k_{irr}.C \qquad (۵)$$

$$C=0 \qquad t=0, \qquad 0<z<L \qquad (۶)$$

$$S_e=S_k=0 \qquad t=0, \qquad 0<z<L \qquad (۷)$$

$$vC_0=-\theta D\frac{\partial C}{\partial z} \qquad z=0, \qquad 0<t \qquad (۸)$$

$$\frac{\partial C}{\partial z}=0 \qquad z=L, \qquad t>0 \qquad (۹)$$

در معادلات بالا C غلظت املاح در محلول خاک ($mgL^{-1}$)، $\theta$ مقدار آب خاک ($m^3/m^3$)، $\rho$ وزن مخصوص ظاهری خاک ($Mg/m^3$)، D ضریب پخشیدگی – پراکنشی ($m^2/h$)، v سرعت جریان آب در منافذ خاک (m/h)، z عمق خاک (m) و t زمان (h) است. بعلاوه Se مقدار املاحی است ($mgKg^{-1}$ soil) که به صورت تعادلی و برگشت پذیر جذب می شود؛ $S_k$ مقدار املاحی است ($mgKg^{-1}$ soil) که به صورت سینتکی و برگشت پذیر جذب می شود؛ Q مقدار املاحی است ($mgKg^{-1}$ soil) که به صورت برگشت ناپذیر جذب می شود، $k_1$ و $k_2$ به ترتیب ضرائب سرعت رفت و برگشت ($h^{-1}$) و n مرتبه واکنش می باشد. معادلات (۶) تا (۹) بیانگر شرایط اولیه و حدی می باشند.معادلات (۱) تا (۹) به صورت عددی با استفاده از روش تفاضل محدود متناسب با شرایط اولیه و حدی بالا به کمک کامپیوتر حل شدند.

## مواد و روش‌ها

برای بررسی حرکت و بر هم کنش های کادمیم در خاک، خاک هائی با ویژگی های فیزیکی، شیمیایی و تاکسونومیکی متفاوت به آزمایشگاه آورده شدند. نمونه برداری از خاک های جنگلی منطقه خیرود کنار، جنوب تهران، ایستگاه تحقیقاتی فرسایش و حفاظت خاک کوهین و باغ و مزرعه دانشکده کشاورزی کرج انجام پذیرفت. نمونه‌ها از زیر عمق ۱۰ سانتیمتری (واقع در افق A) این خاک ها و به صورت دست خورده برداشته شدند.

برای تعیین پارامترهای موجود در معادلات انتقال و جذب و نیز کارایی مدل ارائه شده برای پیشگویی حرکت کادمیم در خاک آزمایش های جابجایی اختلاط پذیر۱ انجام گرفت و بر مبنای آنها منحنی های رخنه برای هر کدام از خاک های مورد آزمایش تعیین گردید. آزمایشات جابجایی اختلاط پذیر به روش سلیم۲ و همکاران (۱۹۸۷) انجام گرفت.

## نتایج و بحث

آماره ای که برای تخمین خوب برازش مدل به داده ها آزمایش بکار برده شده است، $R^2$ می باشد. $R^2$ بالا و پراکندگی تصادفی داده های آزمایش حول منحنی پشگویی شده نشان می دهند که مدل ارائه شده به خوبی به داده های آزمایش فیت شده است. این موضوع مبین آن است که مدل ارائه شده به خوبی می تواند حرکت کادمیم در خاک را شبیه سازی کند. خروجی های این مدل عبارتند از پیشگویی غلظت و جذب کادمیم با زمان و عمق. بعلاوه با استفاده از این مدل می توان تغییرات جذب تعادلی را با غلظت (ایزوترم فرندلیچ) محاسبه کرد.

مدل ارائه شده برای دامنه گسترده ای از خاک ها با ویژگی های فیزیکی و شیمیایی متفاوت استفاده شد و در هر مورد پارامترهای آن با استفاده از روش حداقل مربعات۳ تعیین گردید.از آنجا که تعیین این پارامترها پر هزینه و وقت گیر است، بین پارامتر های مدل و ویژگی های زودیافت خاک روابط رگرسیون بر قرار کردیم.

معادله پخشیدگی-پراکنشی یک معادله نظری است که از نظریه جابجایی اختلاط پذیر مشتق می شود و بر مبنای مفاهیم اساسی فیزیکی و ترمودینامیکی مانند جریان توده ای، پخشیدگی، جریان پراکنشی و قانون بقای جرم پایه گذاری شده است. در این تحقیق ملاحظه شد که چنانچه این معادله با مدل دو مکانی سینتیکی-تعادلی جذب ترکیب شود و تولید/مصرف برگشت ناپذیر به صورت یک فرایند سینتیکی مرتبه اول توصیف شود، ابزار مناسبی برای پیشگویی حرکت کادمیم در خاک ایجاد می شود. معادلات دیفرانسیلی حاصله را می توان با استفاده از شرایط اولیه و حدی مناسب به روش های عددی حل کرد. پارامترهای این مدل را می توان با فیت کردن مدل به منحنی های رخنه بدست آورد. همچنین می توان با در دست داشتن ویژگی های زودیافت خاک و با استفاده از معادلات رگرسیونی که در این تحقیق ارائه شده است مقدار هر کدام از پارامترهای مدل را بدست آورد. این منحنی ها را می توان در آزمایشگاه یا در شرایط مزرعه تهیه نمود. با قرار دادن این پارامترها در مدل می توان غلظت و جذب کادمیم را در هر زمان و هر عمق محاسبه کرد.

## منابع مورد استفاده


۱- محلوجی، هاشم .۱۳۷۵. آمار مهندسی. ترجمه. چاپ اول. مرکز نشر دانشگاهی. تهران. ایران.

۲- مهری، بهمن و رضا نخعی .۱۳۸۰. محاسبات عددی. ویرایش دوم. چاپ دوم. انتشارات آییژ. تهران. ایران.

3- Amacher, M.C., H.M.Selim, and I.K. Iskandar .1988. Kinetics of chromium .VI. and cadmium retention in soils. Soil Sci. Soc. Am. J. 52:398-408.

4- Amozegar-Fard , A., W.H. Fuller, and A.W. Warrick .1984. An approach to predicting the movement of selected polluting metals in soils. J. Environ. Qual. 13:290-297.

5- Holly, F.M., and A. Preissmann .1977. Accurate calculation of transport in two dimensions. J. of the Hydr. Div., Vol. 103, No. HY11: 1259-1277.

6- Selim , H.M., M.C. Amacher and I.K. Iskandar .1990. Modeling the transport of heavy metals in soils. Monogr.90-2. U.S. Army Cold Regions Res. Eng. Lab., Hanover, NH.

7- Selim, H.M., R. Schulin and H. Fluhler.1987. Transport and ion exchange of calcium and magnesium in an aggregated soil. Soil Sci. Soc. Am. J. 51:876-884.

8- van Genuchten, M.Th., and J.C. Parker .1984. Boundary conditions for displacement experiments through short laboratory soil columns. Soil Sci. Soc. Am. J. 40:473-480.

9- van Genuchten, M.Th., and P.J. Wierenga .1986. Solute dispersion coefficient and retardation factors. In Methods of Soil Analysis. Rart I . A. Klute, ed. 2nd ed. Agronomy. Monograph.9. Madison, Wisconsin: ASA and SSSA 1025-1054.


1-miscible displacement experiments
2-Selim et al. 1987.
3-Least – squares optimization method