



تعیین دقت دو مدل CDE و MIM با استفاده از روش حل معکوس در انتقال آلودگی تری کلرواتیلن (TCE) در یک محیط متخلخل کربناته

زینب احمدی مقدم^{*}، سید حسن طباطبائی

گروه مهندسی آب، دانشکده کشاورزی، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد، ایران

تاریخچه داوری:

دریافت: ۱۳۹۶/۰۵/۱۹
بازنگری: ۱۳۹۶/۱۱/۱۱
پذیرش: ۱۳۹۶/۱۲/۱۴
ارائه آنلاین: ۱۳۹۷/۰۱/۲۰

کلمات کلیدی:

تری کلرواتیلن
حل معکوس
مدل CDE
مدل MIM
STANMOD و HYDRUS-1D

خلاصه: این پژوهش با روش حل معکوس به شبیه‌سازی انتقال TCE با نرم‌افزارهای Hydrus-1D و STANMOD و دو مدل انتقال آلودگی جابجایی-انتشار املاح (CDE) و روان-ساکن (MIM) پرداخته است. در این پژوهش از داده‌های مقاله Yolcubal and Akyol در سه غلظت ۱۱۰، ۱۱۳ و ۱۳۰۰ میلی گرم بر لیتر TCE استفاده گردید که سال ۲۰۰۱ در شهری از آنتالیا روی بافت خاک شنی لومی با متوسط وزن مخصوص ظاهری ۱/۳ گرم بر سانتی متر مکعب انجام شده بود. آزمایش‌ها در ستون‌هایی به طول ۱۵ سانتی متر در شرایط اشباع انجام شدند. در بازه‌های زمانی مختلف نمونه‌هایی از خروجی ستون‌ها برای تعیین غلظت TCE و رسم منحنی رخنه گرفته شد. نتایج حل معکوس با HYDRUS و STANMOD نشان دادند که مدل MIM ضریب همبستگی بالاتری در برازش منحنی رخنه نسبت به مدل CDE دارد. بیشترین میزان ضریب همبستگی ۰/۹۷ در غلظت ۱۳۰۰ میلی گرم بر لیتر با حل معکوس تحلیلی و مدل MIM شد. کمترین میزان خطا در تخمین ضریب انتشار (به ترتیب صفر و ۳/۵ درصد در دو مدل CDE و MIM) شد. درصد خطا در تخمین ضرایب ایزوترم جذب در حل معکوس عددی و تخمین فاکتور تأخیر در حل معکوس تحلیلی در غلظت ۱۱۳ میلی گرم بر لیتر بیشتر از دو غلظت دیگر شد.

۱- مقدمه

قابلیت جذب بالای آن به مواد آلی خاک، در خاک باقی می‌ماند و به همین دلیل شبیه‌سازی حرکت TCE به ویژه در مناطق صنعتی برای جلوگیری از آلوده شدن منابع آب زیرزمینی اهمیت دارد. استاندارد EPA در خصوص میزان حد مجاز تری کلرواتیلن ۵ میکروگرم در لیتر به صورت MCL و استاندارد MCLG این آژانس صفر است [۱]. از جمله معادلات حاکم بر انتقال املاح در خاک می‌توان به دو مدل جابه‌جایی-انتشار (Convection Dispersion Equation, CDE) و مدل روان-ساکن (Mobile-Immobile Model, MIM) را نام برد. مدل جابه‌جایی-انتشار املاح یا CDE به صورت زیر است .

تری کلرواتیلن (TCE) از تولیدات اصلی صنایع پتروشیمی است که استفاده از آن رو به افزایش است. تری کلرواتیلن یک اتیلن استخلافی است که در آن سه اتم هیدروژن اتیلن با سه اتم کلر جایگزین می‌شود و این حلال با فرمول C_2HCl_3 مایعی با بوی شیرین و بی‌رنگ است. کاربرد TCE در زدودن گریس از سطح فلزات، حلال خانگی و حلال‌های تجارتي، پاک‌کننده رنگ، ضد عفونی‌کننده، ماده آتش‌نشان و ماده بیهوش‌کننده است. همچنین در صنایع مختلف از جمله اتومبیل‌سازی، فلزات، رنگ‌سازی، الکترونیک، فولاد و چوب نیز از این ماده استفاده می‌شود. زمانی که TCE به محیط زیر سطح زمین راه یابد، بین خاک و آب توزیع می‌شود. به دلیل انحلال پایین و

^{*} نویسنده عهده‌دار مکاتبات: Zahmadimoghdam2014@gmail.com



وسیعی از آن‌ها با استفاده از روش تفاضل محدود در ۲۰ سال گذشته توسعه داده شد. امروزه مدل‌های عددی در قالب برنامه‌های مختلف کامپیوتری توسط پژوهش‌گران برای دامنه وسیعی از شرایط اولیه و مرزی حرکت آب و املاح در خاک و شرایطی مانند عکس‌العمل گیاه به رژیم‌های آبی، حرکت و تغییر شکل نیتروژن، مدیریت آبیاری، نمک‌ها و پساب‌ها استفاده می‌شوند. این مدل‌ها انعطاف‌پذیرتر از مدل‌های تحلیلی هستند به گونه‌ای که برای شبیه‌سازی حرکت انتقالی املاح در مزرعه مؤثرتر هستند اما طبیعت قطعی این مدل‌ها استفاده از آن‌ها را به دلیل تغییرپذیری مکانی ویژگی‌های هیدرولیکی خاک دشوار کرده است. این مدل‌ها برای کارهای تحقیقاتی به شدت استفاده می‌شوند. از میان مدل‌های عددی و یک‌بعدی حرکت آب و املاح در خاک در محیط‌های اشباع و غیراشباع می‌توان به مدل‌های HYDRUS-1D، SWAP، WAVE و MACRO و از مدل‌های تحلیلی به STANMOD اشاره کرد. استفاده از مدل‌ها می‌تواند موجب صرفه‌جویی زیاد در وقت و هزینه‌ها گردد؛ ولی این پیش‌بینی زمانی مفید و کاربردی است که دقت و اعتبار مدل در این برآوردها، بررسی شود. پس باید کارایی مدل‌های انتقال آلودگی برای املاح ارزیابی شود [۲].

مدل HYDRUS-1D یکی از مدل‌های پیشرفته در ارتباط با حرکت یک‌بعدی آب، نمک‌ها و گرما در خاک است این مدل توسط سیمونک و همکاران^۲ (۱۹۹۸) در آزمایشگاه شوری آمریکا بسط داده شد و شامل حل عددی معادلات جابه‌جایی و انتشار (CDE) برای بررسی حرکت آلودگی و گرما در خاک است. معادلات به روش عناصر محدود حل و قادر به شبیه‌سازی حرکت آلودگی در شرایط اشباع و غیر اشباع است و حتی ویژگی‌های خاک را به روش معکوس تخمین می‌زند [۳]. کیسی و سیمونیک^۳ (۲۰۰۱) در پژوهشی به آنالیز معکوس انتقال TCE پرداختند. در این پژوهش انتقال TCE در غلظت ۴۲ میلی‌گرم بر لیتر با سرعت‌های ۳/۱، ۶/۲ و ۱۲/۴ میلی‌متر بر دقیقه به ستون‌های خاک با قطر ۲۱/۴ میلی‌متر و ارتفاع ۱۲۴ میلی‌متر از دو جنس آهنی و جنس آهن با روکش مسی بررسی شد. در این پژوهش با نرم‌افزار 1D-HYDRUS با روش حل معکوس منحنی‌های رخنه را برازش دادند. نتایج نشان داد نرم‌افزار 1D-HYDRUS با مدل جابه‌جایی-انتشار و مدل روان-ساکن توانایی شبیه‌سازی منحنی

که در آن C غلظت املاح یا آلودگی در محلول آب خاک، Z فاصله، v سرعت جریان مقدار رطوبت حجمی و ضریب De ضریب انتشار هیدرودینامیکی است. این معادله برای بررسی حرکت املاح و آلودگی در محیط‌های همگن و برای نمک‌ها و یون‌های غیرواکنش‌گر کارایی دارد.

نتایج برخی از پژوهش‌ها نشان داده است که فقط بخشی از آب موجود در خاک در انتقال نمک‌ها دخالت دارد [۲]. بر این اساس می‌توان آب موجود در خاک را به دو بخش ساکن و روان تقسیم کرد. بخشی از آب موجود در خاک را که بر انتقال توده‌ای نمک‌ها نقش دارد در اصطلاح بخش متحرک یا روان و بخش دیگر را غیرمتحرک و در اصطلاح ساکن نامیده می‌شود. بر این اساس مدل فیزیکی غیرتعدالی یا دوناحیه‌ای یا مدل روان-ساکن (MIM) اولین بار توسط کوتس و اسمیت^۱ ۱۹۵۶ ارائه شد و در مسائل مهندسی نفت و بعدها از آن برای انتقال آلودگی و نمک‌ها در خاک نیز استفاده شد [۲].

$$\theta_m \frac{\partial C_m}{\partial t} + \theta_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_e \frac{\partial C_m}{\partial z} \right) - \frac{\partial (q_m C_m)}{\partial z} \quad (2)$$

$$\theta_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \alpha (C_m - C_{im}) \quad (3)$$

که در آن m و im به ترتیب نشان دهنده بخش غیرمتحرک و متحرک هستند. C غلظت و α ضریب تبادل جرمی املاح است. شکل بی‌بعد این معادله به صورت زیر است:

$$\beta R \frac{\partial C_1}{\partial t} = \frac{1}{p} \frac{\partial^2 C_1}{\partial z^2} - \frac{\partial C_1}{\partial z} - \omega (C_1 - C_2) \quad (4)$$

$$(1 - \beta) R \frac{\partial C_2}{\partial t} = \omega (C_1 - C_2) \quad (5)$$

که در آن: C_1 و C_2 غلظت اولیه و ثانویه آلاینده در فاز مایع خاک R فاکتور تأخیر، v سرعت متوسط حرکت آب در منافذ خاک، x طول ستون خاک و t زمان و B پارامتر بی‌بعد ضریب جزئی غیر تعادلی، ω پارامتر بی‌بعد ضریب تبادل جرمی املاح است.

روش‌های حل عددی انتقال آلودگی در خاک اولین بار برای مدل‌سازی آب-خاک در اوایل دهه ۱۹۶۰ به کار برده شدند و دامنه

2 Simunek

3 Casey

1 Kotes & smit

انتشار به نام مدل CDE در حالت تعادلی و غیرتعادلی استفاده می‌شود که به طور معمول پارامترهای ورودی به آن به روش معکوس از داده‌های منحنی رخنه به دست می‌آید. اسپایرلاکس و همکاران^۲ (۱۹۹۹) با حل عددی به شبیه‌سازی انتقال تتراکلرواتیلن در محیط متخلخل با مدل 2D-CHAIN پرداختند. نتایج آن‌ها نشان داد که مدل قادر است میزان غلظت TCE را با دقت بالا شبیه‌سازی کند [۹]. رایلی و همکاران^۳ (۲۰۰۶) در پژوهشی به شبیه‌سازی غلظت تری‌کلرواتیلن (TCE) و تتراکلرواتیلن با نرم‌افزار STANMOD در عمق‌های مختلف اکیفر پرداختند و در نرم‌افزار از مدل CDE و مدل‌های غیرتعادلی استفاده شد. نتایج این پژوهش نشان داد که مدل CDE در برازش منحنی رخنه و تخمین ضرایب انتقال دارای دقت بالاتری نسبت به مدل‌های MIM است [۱۰].

آکیول و یولکابال^۴ (۲۰۱۱) در پژوهشی انتقال TCE را در خاک‌های کربناته در غلظت‌های مختلف بررسی کردند و با مدل خطی CDE، غیر خطی CDE و خطی MIM ضرایب انتقال را تخمین و منحنی رخنه را برای غلظت‌های مختلف ۱۱۰، ۱۱۳ و ۱۳۰۰ میلی‌گرم بر لیتر TCE شبیه‌سازی کردند (مدل FITNLNE). نتایج آن‌ها نشان داد که مدل‌های خطی و غیرخطی MIM دارای ضریب رگرسیون بالاتر (۰/۹۸ تا ۰/۹۴) و خطای کمتری نسبت به مدل CDE هستند. و بیشترین میزان ضریب همبستگی و کمترین مقدار خطا در غلظت ۱۳۰۰ میلی‌گرم بر لیتر شد [۱۱]. تانگ و همکاران^۵ (۲۰۰۹) در پژوهشی با ارتقاء تخمین پارامترها ورودی برای ستون‌های آزمایش مدل‌های CDE و MIM را روی آلاینده‌هایی مانند بور و بروماید ارزیابی کردند نتایج آن‌ها با نرم‌افزار CXTFIT نشان داد که مدل MIM به دلیل پارامترهای ورودی بیشتر نسبت به مدل‌های تعادلی دارای خطای بیشتری هستند، ولی اگر داده‌های ورودی به مدل کالیبره شوند و همبستگی بین بالاتر باشند، میزان حساسیت مدل نیز کمتر و خطای برازش منحنی رخنه با حل معکوس نیز کمتر است. نتایج این پژوهش نیز نشان داد که در سرعت‌های بالا مدل MIM نسبت به مدل‌های CDE دارای دقت بالاتر در برازش منحنی‌های رخنه است [۱۲]. قائمی‌زاده و همکاران (۱۳۹۳) در پژوهشی به شبیه‌سازی حرکت کادمیم در شرایط مختلف خاک با مدل MIM با

رنه با روش حل معکوس را با ضریب همبستگی بالاتر از ۰/۹ سرعت پایین تا زیاد را دارد و همچنین در سرعت‌های بالا مدل MIM نسبت به مدل CDE دارای خطای کمتر در برازش منحنی رخنه در هر دو نوع جنس ستون‌ها را داشتند [۴]. ماسی‌پان و همکاران^۱ (۲۰۱۶) حرکت بروماید را در شرایط غیراشباع و اشباع در خاک لوم‌شنی در ستون‌های به قطر ۷ و ارتفاع ۲۵ سانتی‌متر بررسی کردند. در این پژوهش میزان غلظت بروماید در عمق‌های مختلف ۶/۲۵ سانتی‌متری در زمان‌های مختلف اندازه‌گیری شد و برای شبیه‌سازی و تخمین میزان پخشیدگی از نرم‌افزار HYDRUS-1D استفاده شد. نتایج نشان داد که حل معکوس با HYDRUS-1D با مدل CDE توانست منحنی‌های رخنه را در عمق‌های مختلف با ضریب همبستگی بالای ۰/۹۹ در دو حالت اشباع و غیراشباع برآورد کند و همچنین نتایج نشان داد که با افزایش عمق میزان پخشیدگی افزایش می‌یابد و همچنین رابطه‌ای با رگرسیون بالا بین عمق و میزان پخشیدگی در شرایط غیراشباع و اشباع یافتند [۵]. شیرانی و همکاران (۱۳۹۰) به شبیه‌سازی حرکت بروماید در ستون‌های دست خورده خاک با استفاده از مدل HYDRUS-1D پرداختند نتایج این پژوهش نشان داد که مدل بیشترین حساسیت را به تغییرات رطوبت اشباع دارد و این نرم‌افزار قادر به شبیه‌سازی حرکت بروماید با دقت بالا است و این دقت در شبیه‌سازی با مدل روان-ساکن (MIM) بالاتر از مدل CDE است [۶]. مرادزاده و همکاران (۱۳۹۲) به شبیه‌سازی آبشویی نیترات با نرم‌افزار HYDRUS-1D پرداختند و این نرم‌افزار را قادر به شبیه‌سازی حرکت نیترات با دقت بالا بیان کردند. همچنین دریافتند که معادله جابه‌جایی-انتشار دارای دقت بالاتری نسبت به مدل روان-ساکن است [۷]. چاوشی و همکاران (۱۳۹۴) به شبیه‌سازی حرکت فلوراید در خاک آهکی با استفاده از مدل HYDRUS-1D پرداختند و بیان کردند HYDRUS-1D به خوبی حرکت و تغییرات غلظت فلوراید در نیم‌رخ خاک را شبیه‌سازی کرده است و مدل بیشترین حساسیت را به رطوبت اشباع و هدایت هیدرولیکی اشباع را دارد [۸]. مدل STANMOD بر پایه روابط توسعه داده شده در مدل‌های HYDRUS یک و دو بعدی عمل می‌کند و کلیه روابط بر اساس زبان برنامه‌نویسی فرترن توسعه داده شده است. در کد CXTFIT که از زیرمدل‌های STANMOD است از حل تحلیلی معادله جابه‌جایی-

2 Chaerlakens et al

3 Riely et al

4 Akyol & Yolcubal

5 Tang et al

1 Masipan et al.

می‌شد. غلظت TCE در مقادیر بالا با دستگاه اسپکتوفتومتر با اشعه‌ی ماوراء بنفش-مرئی (UV-VIS) با طول موج ۲۰۰ نانومتر اندازه‌گیری و غلظت‌های پایین با روش کروماتوگرافی تعیین شد.

شکل معادله ایزوترم جذب باید مشخص شود. اشکال مختلف ایزوترم جذب: خطی، فروندلیش و لانگمر است که شکل کلی این معادله به صورت زیر است:

$$S = \frac{K_d C^m}{1 + \eta C^m} \quad (۶)$$

که در آن: K_d : ضریب جذب و S : میزان جذب و m و η ضرایب معادله ایزوترم جذب برای ایزوترم جذب خطی هر دو مقدار صفر هستند و برای ایزوترم جذب فروندلیش η صفر است. با توجه به اطلاعات خود پژوهش انجام شده به ازای غلظت‌های کمتر از ۱۲۲ میلی‌گرم بر لیتر TCE ایزوترم برآورد شده فروندلیش و در مقادیر بالاتر از ۱۲۲ میلی‌گرم بر لیتر ایزوترم خطی دقت بالاتری را داشت. به این دلیل در نرم‌افزار HYDRUS-1D میزان ضریب η صفر فرض شد.

بر مبنای استخراج اطلاعات از مقاله مذکور دبی (Q)، زمان تزریق ($T0$)، وزن مخصوص ظاهری خاک (ρ_b)، ضرایب ایزوترم Kd و m (محاسباتی)، فاکتور تأخیر (R) و ضریب انتشار (Kd) در سه غلظت مورد مطالعه در جدول ۱ ارائه شده است.

در این پژوهش حل معکوس عددی انتقال آلودگی TCE با نرم‌افزار HYDRUS-1D و حل معکوس تحلیلی با نرم‌افزار STANMOD با دو مدل CDE و MIM انجام شد. روش حل معکوس یکی از روش‌های غیر مستقیم برای تخمین پارامترهای مؤثر است و در واقع یک روش بهینه‌سازی است که با کمینه کردن یک تابع هدف قادر است پارامترهای موردنظر را برآورد کند و این روش بیشتر در شرایط اشباع به کار گرفته می‌شود [۲]. شرایط اولیه، تحلیل نمونه‌های خاک قبل از شروع آزمایش نشان داد که غلظت TCE در تمامی خاک‌های مورد استفاده ناچیز بوده است $C(x,0)=0$. برای شرایط مرزی ورودی، میزان غلظت و مدت زمان تزریق TCE و همچنین میزان غلظت مشاهداتی در زمان‌های مختلف TCE (منحنی رخنه) است. داده‌های منحنی‌رخنه در نرم‌افزار STANMOD به صورت حجم منفذی (PV) در برابر نسبت غلظت به غلظت اولیه ($C/C0$) بود (چون شکل معادلات به صورت بی‌بعد بوده و به شکل معادله‌های (۴) و (۵)

کد CXTFIT که از زیرمدل‌های STANMOD را انجام دادند. نتایج حاصل از شبیه‌سازی نشان داد که بهترین برازش منحنی‌های رخنه حاصل از داده‌های شبیه‌سازی و مشاهده‌ای برای خاک لومی با ضریب همبستگی ۰/۸۴ شد [۱۳].

هدف از این پژوهش با توجه به گسترش استفاده از مواد حاوی TCE در مناطق صنعتی ارزیابی حل معکوس عددی و تحلیلی با مدل‌های جابه‌جایی-انتشار و مدل فیزیکی غیرتعادلی است که بتوانند میزان غلظت تری‌کلرواتیلن را در زمان‌های مختلف در عمق مورد نظر خاک مشخص کند تا از آن بتوان برای انتشار آلودگی TCE در آب‌های زیرزمینی استفاده شود. بیشتر پژوهش‌هایی که انجام شده است، حل عددی و یا حل تحلیلی را فقط بررسی کردند. به همین دلیل این پژوهش به مقایسه حل معکوس عددی و تحلیلی با مدل‌های CDE و MIM پرداخته است.

۲- الگوسازی نظری یا تجربی

در این پژوهش از داده‌های مقاله آکیول و یولکابال (۲۰۰۱) استفاده شده است [۱۱]. ایشان در پژوهش خود TCE را در سه غلظت ۱۱۰، ۱۱۳ و ۱۳۰۰ میلی‌گرم بر لیتر به ستون‌های خاک (خاک کربناته‌دار) تزریق کردند. در خاک‌های کربناته میزان جذب TCE صد برابر کمتر از خاک‌های با مواد آلی است، بخش کربنات کلسیم غالب در خاک سبب عدم جذب بالای TCE می‌گردد. سرعت عدم جذب TCE در خاک‌های کربناته به دلیل وجود کربنات کلسیم، ابتدا زیاد است و سپس این سرعت کاهش می‌یابد؛ در حالی که مواد آلی در خاک‌های آلی سبب جذب TCE می‌شوند. خاک مورد استفاده از عمق ۵۰-۱۰ سانتی‌متری در شهری از آنتالیا (Varsak) برداشته شد. بافت خاک شنی لومی با متوسط قطر ذرات ۰/۱۲ میلی‌متر بود. خاک‌ها در آون خشک شده و از الک ۲ میلی‌متری عبور داده شدند. آزمایش‌ها در ستون‌هایی با طول ۱۵ و قطر ۴/۸ سانتی‌متر انجام شد و جنس ستون فولاد ضد زنگ بود تا از جذب TCE با دیواره‌های ستون جلوگیری شود. ستون‌ها با خاک خشک شده در آون پر شدند و سپس خاک درون آن‌ها اشباع و تزریق TCE با غلظت‌های متفاوت صورت گرفت و تا زمانی که غلظت خروجی به مقدار غلظت ورودی نرسید جریان ادامه داشت و سپس تزریق TCE قطع می‌شد. در زمان‌های مختلف برای به دست آوردن منحنی رخنه از نمونه خروجی ستون خاک نمونه‌برداری و غلظت TCE تعیین

جدول ۱. مقادیر در شرایط آزمایشگاهی و اندازه‌گیری شده

Table 1. observed and Computing Values

TCE concentration (mg/l)	Q (cm ³ /min)	D (cm/h)	ρ_b (gr/cm ³)	T_0 (h)	V (cm/h)	R (-)	ضرایب ایزوترم جذب	
							m (-)	K_d (L/kg)
110	1	1.29	2.9	13.06	5.56	2.69	0.63	0.79
113	0.5	1.29	2.9	25.06	2.76	1.75	0.63	0.35
1300	1	1.33	2.9	13.68	5.49	2.75	1	0.88

ضرایب فاکتور تأخیر، میزان ضریب پخشیدگی و ایزوترم جذب و منحنی رخنه است. که برای مقایسه و ارزیابی کارایی مدل‌ها از دو پارامتر جذرمیانگین مربعات خطا ($RMSE$) و ضریب همبستگی r استفاده شد که مقادیر آن‌ها از معادلات (۷) و (۸) محاسبه شدند.

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (y_{pi} - O_i)^2}{N}} \quad (7)$$

$$r = \frac{N \sum_{i=1}^N O_i y_{pi} - \sum_{i=1}^N O_i \sum_{i=1}^N y_{pi}}{\sqrt{N \sum_{i=1}^N O_i^2 - \sum_{i=1}^N O_i^2 \times (N \sum_{i=1}^N y_{pi}^2 - (\sum_{i=1}^N y_{pi})^2)}} \quad (8)$$

که در آن‌ها: y_{pi} مقادیر محاسبه شده مدل و O_i مقادیر مشاهداتی مدل و N تعداد مشاهدات است.

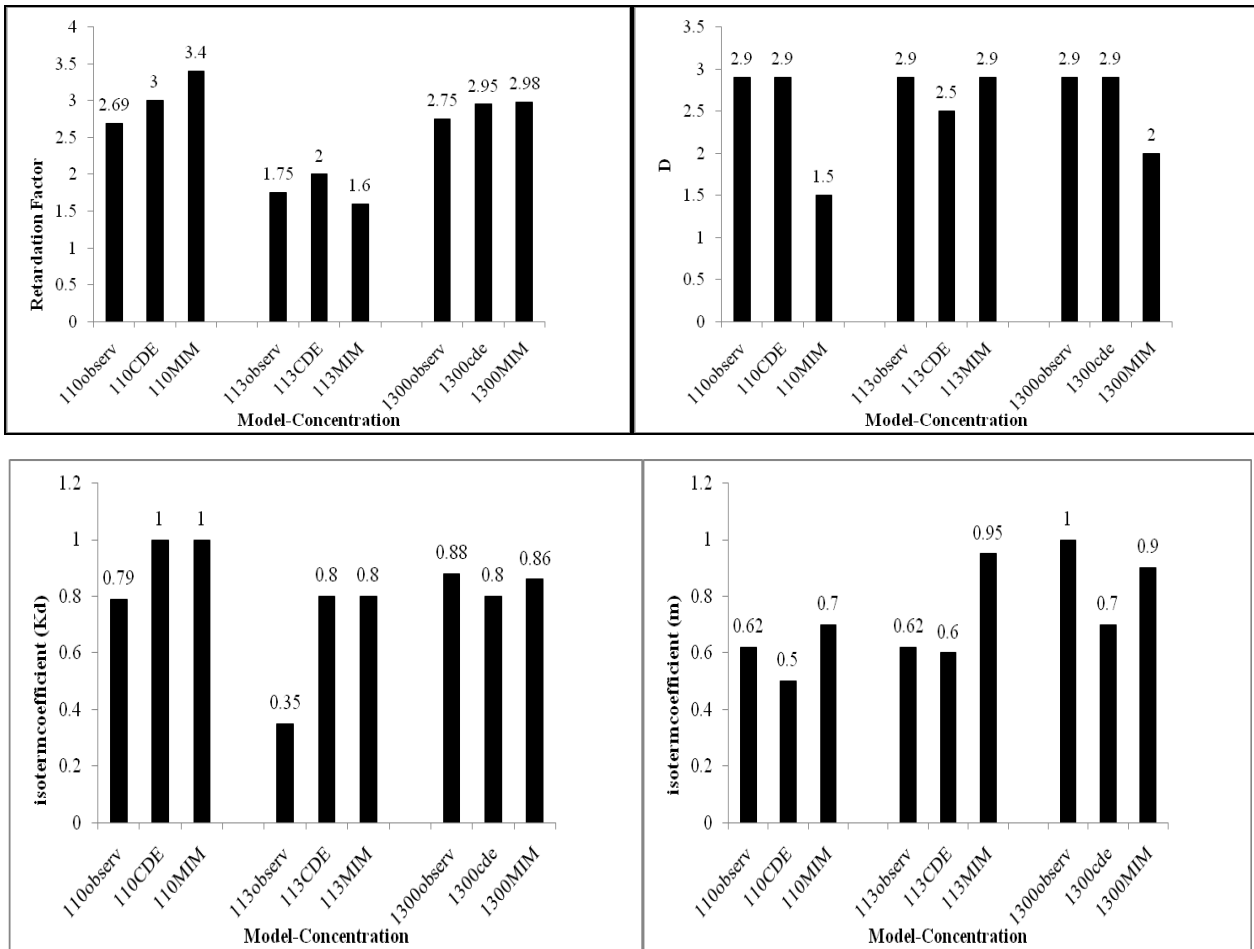
۳- نتایج و بحث

۳-۱- تخمین ضرایب با روش حل معکوس با نرم‌افزار HYDRUS

در شکل ۱ مقادیر ضرایب تخمین زده با روش معکوس حل عددی و تحلیلی با دو مدل CDE و MIM آورده شده است. میزان درصد خطای مقادیر تخمینی ضریب انتشار پذیری، فاکتور تأخیر، ضرایب تجربی ایزوترم جذب k_d و m و آزمایش در جدول ۲ آورده شده است. بیشترین میزان خطا در تخمین ضریب تجربی ایزوترم جذب k_d بوده و کمترین درصد خطا در تخمین ضریب انتشارپذیری مشاهده شد. درصد خطای ضرایب تجربی ایزوترم جذب و فاکتور تأخیر بهینه شده هر دو مدل در غلظت ۱۳۰۰ میلی‌گرم بر لیتر، ناچیز شده است. ایزوترم جذب در نرم‌افزار هایدروس با توجه به مقادیر ضرایب تجربی ایزوترم جذب k_d و m فروندلیش شده است که در غلظت ۱۳۰۰ میلی‌گرم بر لیتر، در پژوهش آکیول و یولکابال (۲۰۱۱) خطی به دست آمد [۱۱].

هستند). ژئومتری در نرم‌افزار HYDRUS-1D، شامل طول ستون خاک (۱۵cm)، واحد طول (cm)، واحد زمان (ساعت)، عمودی بودن ستون خاک و تعداد لایه خاک (یک لایه) بود. شرایط اولیه رطوبت اولیه خاک برابر با رطوبت اشباع در خاک‌های شنی لومی فرض شد. در قسمت مشخصات هیدرولیکی خاک نرم‌افزار HYDRUS-1D در قسمت کاتولوگ خاک بافت آن لومی شنی انتخاب شد که این کاتولوگ‌ها برای بافت‌های مختلف خاک از سوی کارسل و پاریش (۱۹۸۸) ارائه و در خود نرم‌افزار تعبیه شده است، استفاده شد (به دلیل نداشتن مشخصات خاک). در نرم‌افزار STANMOD که بعد زمان ساعت و غلظت به صورت بی‌بعد و طول سانتی‌متر تعریف شد. همچنین، با توجه به مشخص بودن طول ستون خاک، شرایط مرزی خروجی به صورت زهکشی آزاد در نظر گرفته شد.

مقادیر تخمینی حد بالا و پایین برای پارامترهای: فاکتور تأخیر (R)، میزان ضریب پخشیدگی (D) برای مدل CDE وارد شد و با اجرای مدل و انجام سعی و خطا بهترین مقادیر محاسبه شد. در مدل بی‌بعد MIM در نرم‌افزار STANMOD علاوه بر ضرایب فوق، پارامتر بی‌بعد ضریب جزئی غیر تعادلی (B)، پارامتر بی‌بعد ضریب تبادل (ω) و در نرم‌افزار HYDRUS-1D میزان محتوای آب غیرقابل تحرک و ضریب تبادل جرم (α) نیز به مقادیر تخمینی و سعی خطا اضافه شدند. در نرم‌افزار HYDRUS-1D علاوه بر پارامترهای ذکر شده ضرایب ایزوترم جذب (m و k_d) در مقادیر تخمینی در هر دو مدل نیز استفاده شدند که با ورود داده‌های اولیه نرم‌افزار به پردازش داده‌ها می‌پردازد و مقادیر نهایی را برآورد می‌کند. پایان محاسبات زمانی است که مقادیر برآورد شده به یک مقدار ثابت میل کنند و اختلاف بین دو مقدار نهایی برآورد شده حداقل باشد. خروجی‌های حاصل از اجرای نرم‌افزارها با دو مدل CDE و MIM شامل مقادیر برآوردی



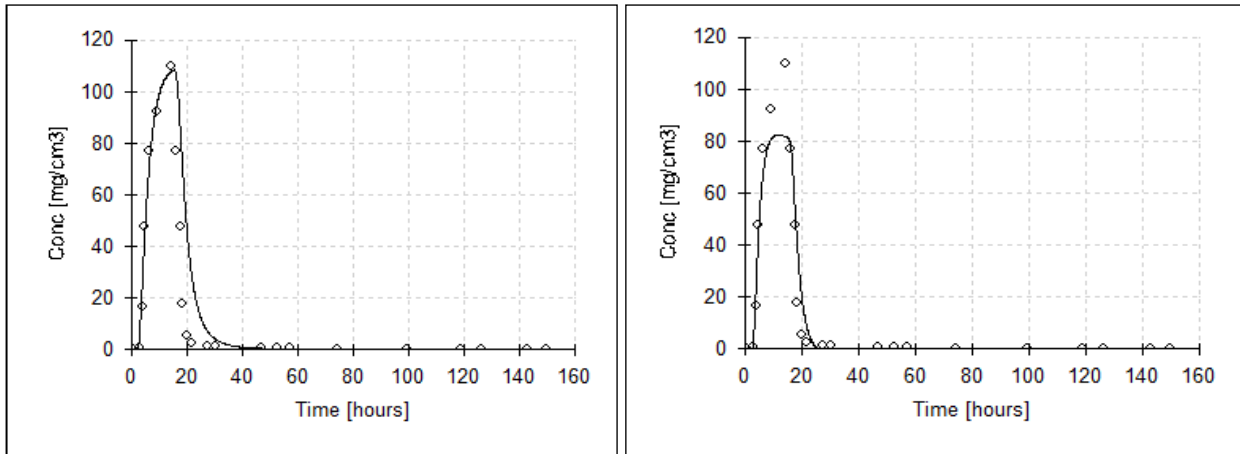
شکل ۱. ضرایب به دست آمده از روش حل معکوس با نرم افزار HYDRUS
 Fig. 1. Coefficients obtained by inverse solution with software HYDRUS

جدول ۲. درصد خطای مقادیر تخمینی حل معکوس نرم افزار HYDRUS با مدل CDE و MIM
 Table 2. percent error values of estimated by inverse solution HYDRUS with CDE and MIM models

K_d	m	R	D	مدل	TCE concentration(mg/l)
26	19	11	0	CDE	110
26	13	26	48	MIM	
128	3	9	14	CDE	113
128	53	8	0	MIM	
9	3	7	31	CDE	1300
2	10	8	31	MIM	

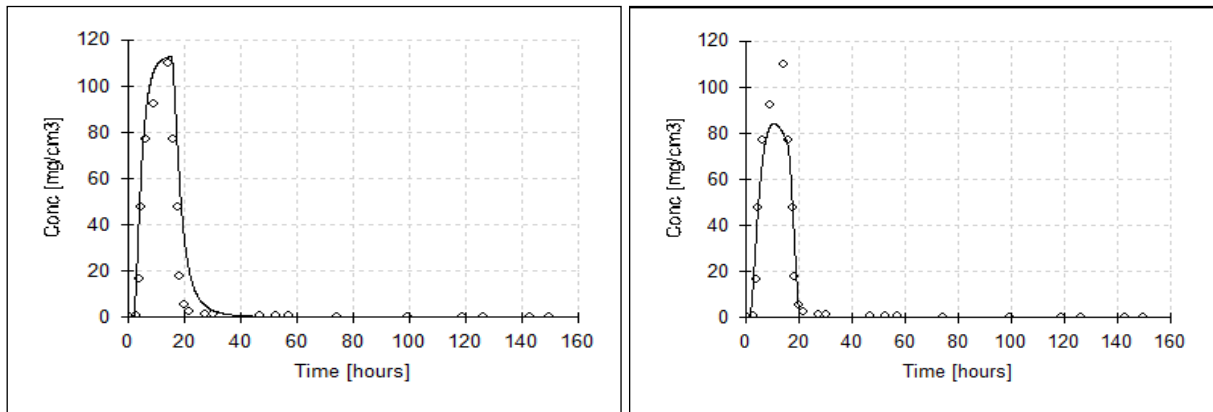
۱۳۰۰ میلی گرم بر لیتر برآزش داده شد (شکل های ۲ تا ۴). بر اساس این شکل ها مدل MIM در برآورد بیشینه مقدار غلظت در منحنی رخنه نسبت به مدل CDE در غلظت های ۱۱۰ و ۱۱۳ میلی گرم بر لیتر اختلاف قابل توجهی را داشتند. در غلظت ۱۳۰۰ میلی گرم بر

۲-۳- شبیه سازی منحنی رخنه با ضرایب بهینه به دست آمده از HYDRUS با مقادیر بهینه شده از حل معکوس، منحنی های رخنه با نرم افزار HYDRUS و با مدل های CDE و MIM در سه غلظت ۱۱۰، ۱۱۳ و



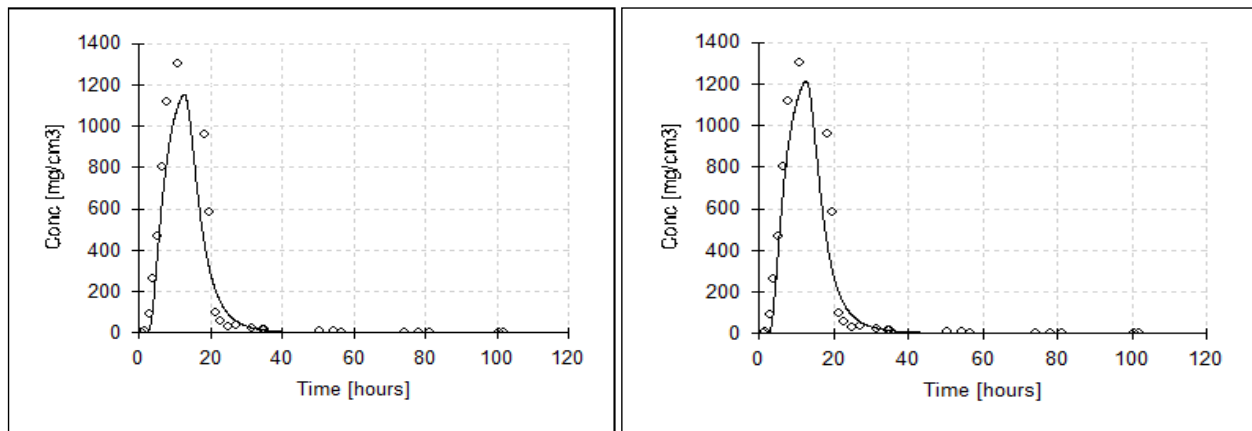
شکل ۲. مقادیر شبیه‌سازی شده نرم‌افزار HYDRUS با مدل CDE (شکل سمت راست) و مدل MIM (شکل سمت چپ) در غلظت ۱۱۰ میلی‌گرم بر لیتر

Fig. 2. Simulated values of HYDRUS at concentration of 110 mg / L with CDE model (right figure) and MIM model (left figure)



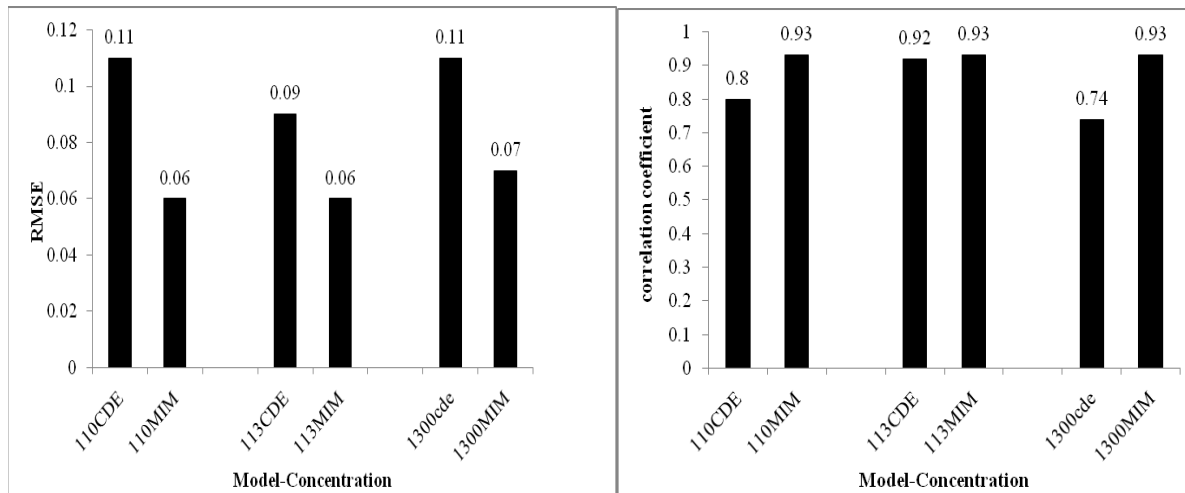
شکل ۳. مقادیر شبیه‌سازی شده نرم‌افزار HYDRUS با مدل CDE (شکل سمت راست) و مدل MIM (شکل سمت چپ) در غلظت ۱۱۳ میلی‌گرم بر لیتر

Fig. 3. Simulated values of HYDRUS at concentration of 113 mg / L with CDE model (right figure) and MIM model (left figure)



شکل ۴. مقادیر شبیه‌سازی شده نرم‌افزار HYDRUS با مدل CDE (شکل سمت راست) و مدل MIM (شکل سمت چپ) در غلظت ۱۳۰۰ میلی‌گرم بر لیتر

Fig. 4. Simulated values of HYDRUS at concentration of 1300 mg / L with CDE model (right figure) and MIM model (left figure)

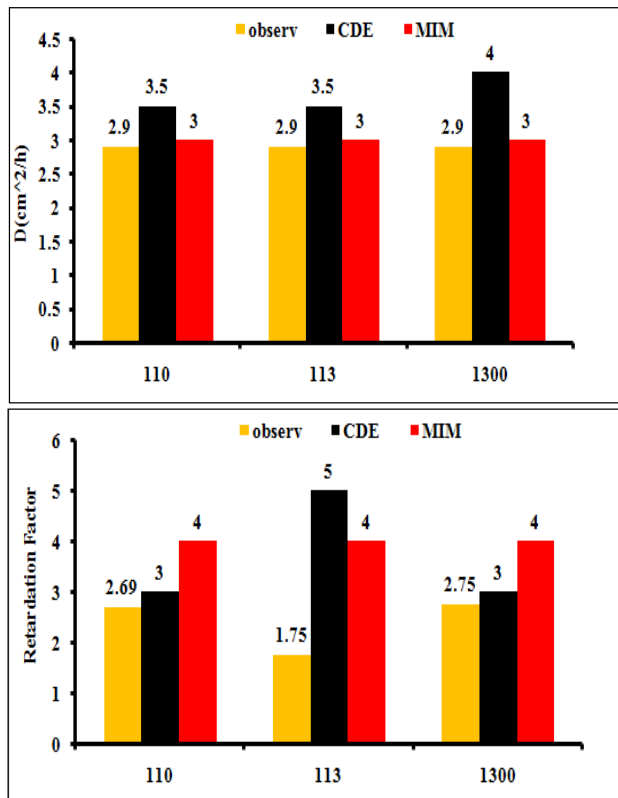


شکل ۵. مقادیر خطای RMSE و ضریب همبستگی r شبیه‌سازی حل معکوس نرم‌افزار HYDRUS با مدل CDE و MIM
 Fig. 5. RMSE error values and correlation coefficient r of inverse solution simulation HYDRUS with CDE and MIM models

تخمینی ضریب انتشارپذیری در مدل روان و ساکن در هر سه غلظت ۳/۵ درصد به دست آمد.

لیتر، بیشینه مقدار غلظت در مدل CDE بیشتر بود، ولی اختلاف چندان زیادی با مدل MIM نداشت.

با توجه به شکل ۵، حل عددی HYDRUS با مدل‌های MIM در هر سه غلظت دارای ضریب همبستگی بالاتری و خطای کمتر نسبت به مدل CDE هستند. پس با لحاظ کردن بخشی از آب موجود در خاک که در انتقال توده‌های نمک‌ها نقش ندارد، دقت مدل در برازش منحنی رخنه بیشتر شده است. مقادیر بهینه آب غیر قابل تحرک تخمینی از مدل MIM در غلظت‌های ۱۱۰، ۱۱۳ و ۱۳۰۰ میلی‌گرم بر لیتر به ترتیب ۵، ۲ و ۰/۰۵ درصد برآورد شد. با توجه به شکل ۵ بیشترین مقدار خطای مدل CDE در غلظت ۱۱۰ و ۱۳۰۰ میلی‌گرم بر لیتر شد. در غلظت ۱۱۳ میلی‌گرم بر لیتر، مدل MIM خطای کمتر و میزان ضریب همبستگی بهتری نسبت به مدل CDE در برازش منحنی رخنه داشت.



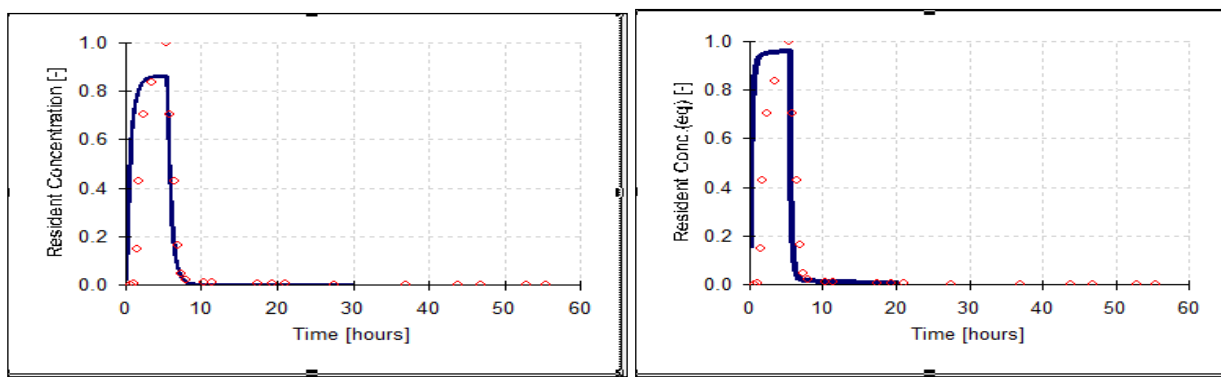
شکل ۶. ضرایب به دست آمده از روش حل معکوس با نرم‌افزار STANMOD
 Fig. 6. Coefficients obtained by inverse solution with STANMOD

۳-۳- تخمین ضرایب با روش حل معکوس با نرم‌افزار STANMOD در شکل ۶ مقادیر ضرایب تخمین زده با روش معکوس حل عددی و تحلیلی با مدل MIM و CDE آورده شده است. درصد خطای مقادیر تخمینی با مقادیر مشاهده‌ای در جدول ۲ آورده شده است. در تمامی غلظت‌ها درصد خطای فاکتور تأخیر قابل توجه شد که شاید به دلیل عدم ورودی مشخصات خاک مانند چگالی ظاهری و رطوبت اولیه خاک در نرم‌افزار STANMOD درصد خطای تخمینی فاکتور تأخیر در آن بیشتر از HYDRUS شده است. درصد خطای مقادیر

جدول ۳. درصد خطای مقادیر تخمینی حل معکوس نرم افزار STANMOD با مدل CDE و MIM

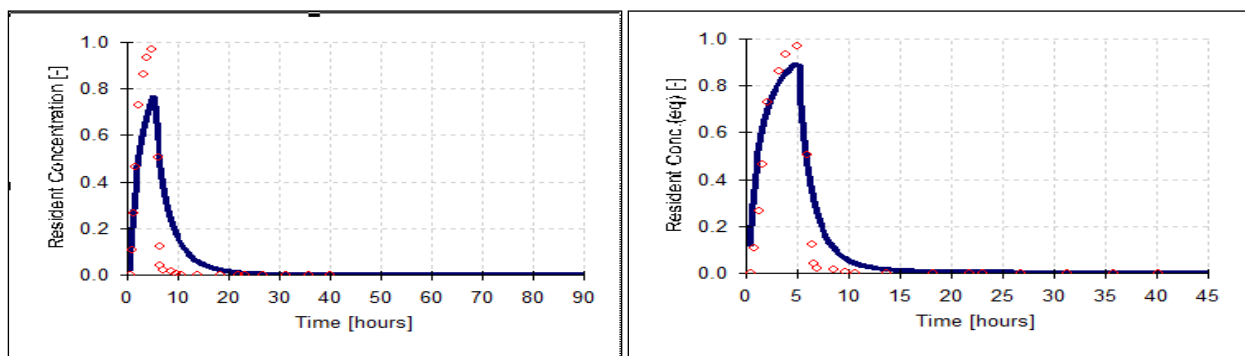
Table 3. Error percentage of estimated values of the inverse solution of STANMOD with CDE and MIM models

K_d	m	R	D	مدل	TCE concentration(mg/l)
26	19	11	0	CDE	110
26	13	26	48	MIM	
128	3	9	14	CDE	113
128	53	8	0	MIM	
9	3	7	31	CDE	1300
2	10	8	31	MIM	



شکل ۷. مقادیر شبیه سازی شده نرم افزار STANMOD با مدل CDE (شکل سمت راست) و مدل MIM (شکل سمت چپ) در غلظت ۱۱۰ میلی گرم بر لیتر

Fig. 7. Simulated amounts of STANMOD at concentration of 110 mg / L with CDE model (right figure) and MIM model (left figure)

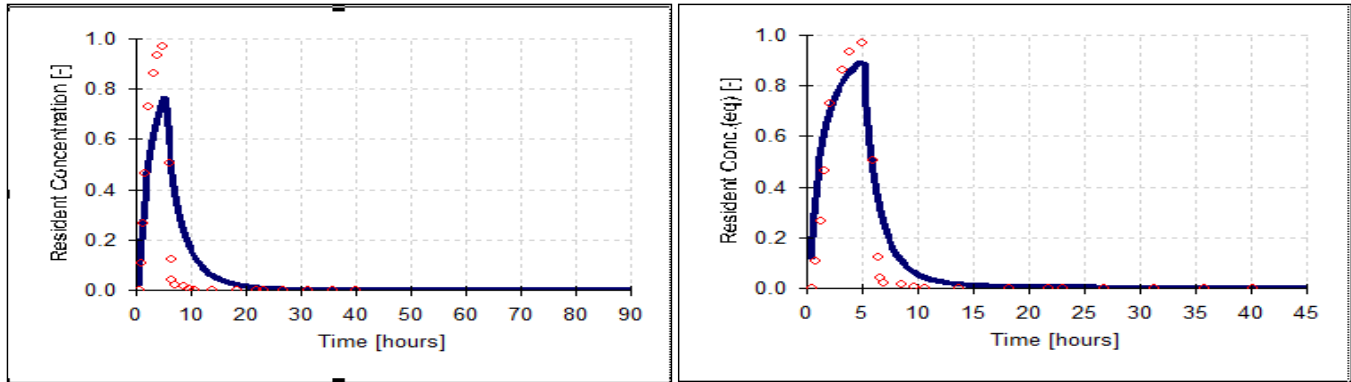


شکل ۸. مقادیر شبیه سازی شده نرم افزار STANMOD با مدل CDE (شکل سمت راست) و مدل MIM (شکل سمت چپ) در غلظت ۱۱۳ میلی گرم بر لیتر

Fig. 8. Simulated amounts of STANMOD at concentration of 113 mg / L with CDE model (right figure) and MIM model (left figure)

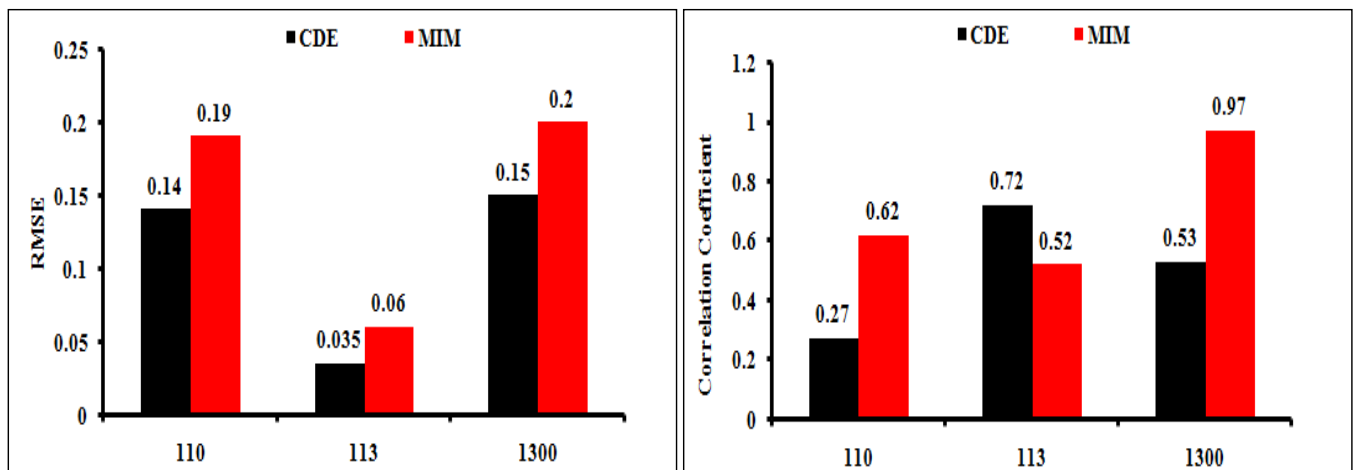
STANMOD و مدل های MIM و CDE در غلظت های ۱۱۰، ۱۱۳ و ۱۳۰۰ میلی گرم بر لیتر برآزش داده شد (شکل های ۷ تا ۹). بر اساس این شکل ها مدل MIM در شبیه سازی منحنی رخنه نسبت به

۳-۴- شبیه سازی منحنی رخنه با ضرایب بهینه به دست آمده از STANMOD با داده های تخمینی حل معکوس منحنی های رخنه با نرم افزار



شکل ۹. شبیه‌سازی شده نرم‌افزار STANMOD با مدل CDE (شکل سمت راست) و مدل MIM (شکل سمت چپ) در غلظت ۱۳۰۰ میلی‌گرم بر لیتر

Fig. 9. Simulated amounts of STANMOD at concentration of 1300 mg / L with CDE model (right figure) and MIM model (left figure)



شکل ۱۰. مقادیر خطای RMSE و ضریب همبستگی شبیه‌سازی حل معکوس نرم‌افزار STANMOD با مدل CDE و MIM

۴- نتیجه‌گیری

نتایج حاصل از حل معکوس با نرم‌افزارهای STANMOD و HYDRUS و مدل‌های CDE و MIM نشان داد که در شبیه‌سازی انتقال تری‌کلرواتیلن مدل CDE نسبت به مدل MIM عملکرد ضعیف‌تری را داشت و مقادیر ضریب همبستگی در بیشتر موارد کمتر از مدل MIM شد. مقایسه ضرایب همبستگی و خطا در دو نرم‌افزار نشان داد که حل معکوس عددی نتایج بهتری را نسبت به حل تحلیلی دارد. میزان تخمین ضرایب در HYDRUS-1D دارای خطای کمتری نسبت به نرم‌افزار STANMOD شد، زیرا در نرم‌افزار HYDRUS-1D علاوه بر پارامترهای معادلات آلودگی به ورودی‌های مشخصات

مدل CDE دقت بالاتری دارد. جذر میانگین مربعات خطا (RMSE) و ضریب همبستگی ۲ با حل تحلیلی STANMOD با مدل‌های CDE و در شکل ۱۰ آورده شده است. بر اساس این شکل، مدل MIM ضریب همبستگی بهتری نسبت به مدل CDE دارد که با توجه به شکل کمترین و بیشترین مقدار خطا به ترتیب در غلظت ۱۱۳ و ۱۳۰۰ میلی‌گرم بر لیتر شد. در غلظت ۱۱۰ و ۱۳۰۰ میلی‌گرم بر لیتر، مدل MIM ضریب همبستگی بالاتری نسبت به مدل CDE در برازش منحنی رخنه نشان داد. در غلظت ۱۱۳ میلی‌گرم بر لیتر حل تحلیلی با مدل CDE دارای ضریب همبستگی بیشتر و خطای کمتری نسبت به مدل MIM شده است.

t	زمان (h)
TO	زمان تزریق آلاینده h
v	سرعت منفذی cm/h
γ	غلظت محاسباتی (شبه‌سازی) mg/L
z	عمق cm
علائم یونانی	
ρ_b	چگالی، g/cm ³
θ	رطوبت (%)
α	α ضریب تبادل جرمی املاح
ω	پارامتر بی‌بعد ضریب تبادل جرمی املاح
B	پارامتر بی‌بعد ضریب جزئی غیر تعادلی،
η	ضریب معادله ایزوترم جذب (-)
زیرنویس	
m	متحرک
im	ساکن یا غیرمتحرک

مراجع

- [1] Agency for Toxic Substances and Disease Registry (ATSDR), Toxicological profile for trichloroethylene (TCE). U.S. Public Health Service, U.S. Department of Health and Human Services, Atlanta, GA, in, 1997.
- [2] F. Abbasi, Advanced soil physics, university of Tehran, 2014. (In Persian)
- [3] J. Simunek, M. Sejnán, M.T. Genuchten, The HYDRUS-1D software package for simulating the one-dimensional movement of water, heat, and multiple solute in variably saturated media, Version 2.0 IGWMC-TPS-70, in: Int. Ground Water Modeling Center, Colorado School of Mines, Golden, Co., 1998.
- [4] F. Casey, J. Simunek, Inverse Analyses of Transport of Chlorinated Hydrocarbons Subject to Sequential Transformation Reactions, Environ. Qual, 30 (2001) 1354-1360.
- [5] T. Masipan, s. Chotpantarat, S. Boonkaewwan, Experimental and modelling investigations of tracer transport in variably saturated agricultural soil of Thailand: Column study. Sustainable, Environment Research Vol. 26 (2016) PP. 97-101.

هیدرولیکی خاک نیز نیاز دارد و اگر این مشخصات مانند رطوبت اشباع خاک، هدایت هیدرولیکی (که در پژوهش حاضر اندازه‌گیری نشده بودند) به دقت اندازه‌گیری و محاسبه شوند بر دقت مدل‌ها در تخمین ضرایب و حتی برازش منحنی رخنه اثر قابل توجهی را دارد. مدل‌ها به مقادیر ورودی حساس هستند و روی نتایج حاصل از شبیه‌سازی اثرگذار خواهد بود و هر چه مقادیر ورودی با حدود اطمینان بیشتری وارد مدل شوند، خطای حاصل این مدل نیز کمتر خواهد شد. کمترین میزان خطا در تخمین پارامتر ضریب انتشار به ترتیب صفر و ۳/۵ درصد در دو مدل CDE و غیرتعادلی شد. بیشترین میزان خطای تخمین در نرم‌افزار STANMOD و HYDRUS-1D به ترتیب مربوط به فاکتور تأخیر و ضرایب ایزوترم جذب در غلظت ۱۱۳ میلی‌گرم بر لیتر در MIM شد. بیشتر پژوهش‌هایی که تاکنون انجام شده است، فقط حل عددی و یا حل تحلیلی را بررسی کرده‌اند. به همین دلیل در این پژوهش به مقایسه حل عددی و تحلیلی با مدل‌های CDE و MIM با روش معکوس پرداخته شد. چون نتایج این پژوهش فقط حاصل از آلاینده تری‌کلرو اتیلن و در یک محیط کربناته بوده است، پیشنهاد می‌گردد حل عددی و تحلیلی را با روش حل معکوس و مستقیم روی بافت‌های مختلف خاک نیز بررسی شود.

فهرست علائم

علائم انگلیسی

C	غلظت mg/L
C_0	غلظت تزریقی آلاینده mg/L
C_1	غلظت اولیه آلاینده در فاز مایع خاک mg/L
C_2	غلظت ثانویه آلاینده در فاز مایع خاک mg/L
CDE	مدل انتقال-انتشار
D_s, D_e	ضریب انتشار cm/h
K_d	ضریب معادله ایزوترم جذب (-)
m	ضریب معادله ایزوترم جذب (-)
N	تعداد داده
O	غلظت داده مشاهداتی mg/L
PV	حجم منفذی
Q	دبی cm ³ /h
R	فاکتور تأخیر
s	میزان جذب mg/L

- 13 (1999) 2847-2859.
- [10] R.G. Riley, J.E. Szecsody, A.V. Mitroshkov, C.F. Brown, Desorption Behavior of Trichloroethene and Tetrachloroethene in U.S. Department of Energy Savannah River Site Unconfined Aquifer Sediments, 2006.
- [11] N.H. Akyol, I. Yolcubal, D.I. Yüksel, Sorption and transport of trichloroethylene in caliche soil *Chemosphere*, 82(6) (2011) 809-816.
- [12] G. Tang, M. Mayes, J. Parker, X. Yin, D. Watson, P. Jardine, Improving parameter estimation for column experiments by multi-model evaluation and comparison, *Hydrology*, 376 (2009) 567-578.
- [13] F. Ghaemizadeh, H. Banejad, O. Bahmani, Cadmium Transport Simulation under Different Soil Conditions Using the Physical Non-Equilibrium Model, *water and soil science* 24(4) (2013) 29-44. (In Persian)
- [6] M. Moradzadeh, H. Moazed, G. Sayyad, Simulation of Nitrate Ion Leaching in a Sandy Loam Soil Treated with Zeolite Using Hydrus-1D Model, *water and soil science* 23(1) (2013) 95-107. (In Persian)
- [7] H. Shiran, M. Kord, G.A. Sayyad, H. Naghavi, Simulating bromide transport in disturbed soil columns using HYDRUS-1D model, *Watershed Management Research* (92) (2011) 20-31. (In Persian)
- [8] E. Chavoshi1, M. Afyuni2, M.A. Hajabbasi, Simulation of Fluoride Transport in a Calcareous Soil Using HYDRUS-1D, *Sci. & Technol. Agric. & Natur. Resour., Water and Soil Sci*, 19(72) (2015) 205-215. (In Persian)
- [9] J. Chaerlakens, D. Mallants, J. Simunek, M.T.V. Genuchten, J. Feyan, Numerical simulation of transport and sequential biodegradation of chlorinated aliphatic hydrocarbons using CHAIN-2D, *Hydrological processes*

چگونه به این مقاله ارجاع دهیم

Z. Ahmadi Moghadam, S. H. Tabatabaei, Evaluation of CDE and MIM Models to Simulate TCE Transport in a Carbonate Porous Media, *Amirkabir J. Civil Eng.*, 53(1) (2021) 383-394.

DOI: [10.22060/ceej.2018.13256.5356](https://doi.org/10.22060/ceej.2018.13256.5356)

