



Simulation and Experimental Study of The Effect of Porous Media Grain Size on Solute Displacement Under The Same Hydraulic Conditions

Saeed Ghaedi¹ | Peyman Afrasiab² | Masoumeh Debari² | Hossein Bagheri³

1. PhD Candidate, Water Engineering Department, University of Zabol, Zabol, Iran.

2. Associate Professor, Water Engineering Department, University of Zabol, Zabol, Iran.

3. PhD Graduate, Water Engineering Department, Bu-Ali Sina University, Hamedan, Iran.

✉Corresponding Author: P_afraziab@yahoo.com

Received:
31 May 2025

Accepted:
18 June 2025

Published:
22 September 2025

Keywords:

*Breakthrough curve,
Dual-site sorption,
Laboratory column,
Equilibrium model,
Nonequilibrium model.*

Extended abstract

Introduction

Understanding the solute transport processes through porous media is important in the sciences of soil, hydrology, and environmental engineering. The wide range of soil and water factors can affect these processes, in which the sizes of particles of granular media play a key role by influencing physical and hydraulic factors, including porosity, pore size distribution, and saturated hydraulic conductivity, and solute transport factors such as dispersion, adsorption, and mobility. Although particle size variations impact the transport of solute and water, the water movement in the media is controlled by the hydraulic gradient, which produces a fixed water velocity in different media. In this regard, modeling can help to better understand the impact of particle sizes of the medium on solute transport. Currently, several models have been developed to predict and simulate solute transport through porous media based on sorption/desorption, advection, and dispersion processes. These include uniform porosity models (such as equilibrium, one-site kinetic, and two-site kinetic models) and non-uniform porosity models (such as dual-porosity and dual-permeability models), all of which are incorporated into the HYDRUS-1D software. Among these models, uniform or single porosity models are more widely used due to their simplicity and fewer unknown coefficients.

Cite this article: Ghaedi, S., Afrasiab, P., Delbari, M. & Bagheri, H. (2025). Simulation and Experimental Study of The Effect of Porous Media Grain Size on Solute Displacement Under The Same Hydraulic Conditions. *Journal of Aquifer and Qanat*, 6 (1), 41-50. DOI: <http://10.22077/jaaq.2025.9512.1114>



Copyright: © 2025 by the authors. Licensee Journal of Aquifer and Qanat. This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Therefore, the current study aims to simulate the effect of particle size of the granular medium on solute transport under saturated conditions by equilibrium, one-site, and two-site sorption models using HYDRUS-1D—a widely used and advanced model for simulating water and solute movement in soils— at experimental column scale.

Materials and Methods

Nine PVC columns with a length of 25 cm and an inner diameter of 8 cm equipped with mesh screen were filled with the granular media with particle size ranges of 0.6-1.2, 1.2-2.4, and 2.4-4.8 mm. Before filling the columns, the media were thoroughly washed multiple times to eliminate initial salts, and after filling, the columns were leached again. Next, 180 cm³ of distilled water containing 1 mmol of potassium nitrate (KNO₃) was injected into the columns using a peristaltic pump with a saturated flow rate of 75 cm³/min. This was immediately followed by a leaching phase using deionized water.

To simulate the salinity breakthrough curve, the advection-dispersion equation coupled with equilibrium, one-site, and two-site sorption models was applied in the HYDRUS-1D program. The initial conditions of the soil profile, bulk density, porosity, and breakthrough curve data were input into the model to obtain solute transport coefficients, including, distribution coefficient (KD), the fraction of equilibrium sites (F), and the first-order rate constant (α). To evaluate the accuracy of the model simulations, statistical indicators such as Root Mean Square Error (RMSE), Cumulative Relative Mass (CRM), and the Coefficient of Determination (R^2) were used.

Results and Discussion

The experimental results revealed that the breakthrough curves of the coarse- and medium-textured media (PV=0.5) appear to arrive earlier than fine-particle media (PV=0.75), due to the higher pore water velocity and larger pore sizes. Additionally, the slope of the breakthrough curve in the fine-textured medium was steeper than that of the others, indicating a more uniform pore size distribution in the fine-textured medium and dilution of solute through lateral pores by transverse flow in coarser media.

The results of modeling showed higher accuracy for the two-site model [RMSE=0.01, CRM=-0.07-0 and R^2 =0.97- 0.99] compared to the one-site model [RMSE=0.01-0.03, CRM= (-0.3)-(-0.07) and R^2 =0.86- 0.97] and equilibria model [RMSE=0.01-0.09, CRM= (-0.65)-(- 0.1) and R^2 =0.54-0.97]. Therefore, it can be concluded that the solute sorption and desorption processes in the above-mentioned media are governed by a combination of equilibrium and kinetic mechanisms. Accordingly, employing multiple sorption mechanisms in solute transport modeling is recommended to improve accuracy and better understand the nature and intensity of the governing transport processes. The values of F and KD also indicated more equilibria sites with less sorption capacity in coarse media due to less favorable sorption sites. Sensitivity analysis of the solute transport parameters of the best model showed that the coefficients of F and KD, with sensitivity values of 0.87 and 0.84, had the highest influence on fitting the breakthrough curve.

Conclusion

This study was conducted to examine the effect of medium particle size on the solute transport at the experimental column scale by various models. The experimental results showed fast displacement of solute through coarse medium with lower concentration due to the solute dilution with water placed in less active lateral pores. The modeling result confirmed the occurrence of both instantaneous and kinetic processes in solute transport through the granular media. Therefore, employing the two-site model can recommend enhancing the accuracy of fitting and a more realistic understanding processes involved in solute transport.



مطالعه شبیه‌سازی و آزمایشگاهی تأثیر اندازه دانه‌های محیط متخلخل بر جابه‌جایی املاح در شرایط هیدرولیکی یکسان

سعید قائدی^۱ | پیمان افراسیاب^۲ | معصومه دلبری^۲ | حسین باقری^۲

۱. دانشجوی دکتری گروه مهندسی آب، دانشگاه زابل، زابل، ایران.

۲. دانشیار، گروه مهندسی آب، دانشگاه زابل، زابل، ایران.

۳. دانش‌آموخته دکتری، گروه مهندسی آب، دانشگاه بوعلی‌سینا، همدان، ایران.

✉ نویسنده مسئول: P_afraziab@yahoo.com

چکیده

شدت جریان و سرعت متوسط در نقاط مختلف آبخوان‌ها علی‌رغم تفاوت‌هایی که در ویژگی‌های فیزیکی محیط‌های متخلخل وجود دارد، می‌تواند یکسان باشد. در این شرایط، جابه‌جایی مواد محلول، متأثر از عوامل منفذی محیط از قبیل اندازه دانه‌ها و سرعت آب‌حفره‌ای است. از این رو، برای شناخت بهتر ضرایب جذب و واجذب و فرآیندهای انتقال مواد، انجام شبیه‌سازی ضروری است. لذا، مطالعه حاضر با هدف بررسی اثر اندازه ذرات محیط متخلخل بر انتقال املاح در شرایط هیدرولیکی یکسان به کمک مدل‌های آزمایشگاهی و شبیه‌سازی با مدل‌های عددی تعادلی و غیر تعادلی اجرا شد. ستون‌های آزمایشگاهی از جنس پی‌وی‌سی به طول ۲۵ سانتی‌متر و قطر داخلی ۸ سانتی‌متر و محیط‌های متخلخل مورد آزمایش از ذرات شن و ماسه‌ی طبیعی بود. نیترات پتاسیم به‌صورت تزریق مقطعی به‌عنوان ماده محلول به ستون‌های خاک تزریق شد. مطابق نتایج آزمایشگاهی، بیشینه‌ی غلظت (C/C_0) در محیط‌های ریز، متوسط و درشت‌دانه به‌ترتیب برابر ۰/۵، ۰/۲۷ و ۰/۳ و ضرایب توزیع آن‌ها (KD) به‌ترتیب ۲/۳، ۱/۸ و ۲/۱ (lit/kg) که نشان‌دهنده رقیق شدن آلاینده‌ها در محیط‌های درشت‌دانه و نگهداشت آن‌ها در محیط‌های ریزدانه است. نتایج شبیه‌سازی نشان‌دهنده دقت‌تر بودن مدل‌های غیر تعادلی دو مکانی ($RMSE=0.01$) و تک‌مکانی ($RMSE=0.01-0.03$) در مقایسه با مدل تعادلی ($RMSE=0.01-0.09$) بود که مبین وجود فرآیندهای جنبشی زمان‌بر در فرآیندهای انتقال املاح است. لذا، استفاده از مدل‌های مشمول فرآیند جنبشی و تعادلی در شبیه‌سازی انتقال مواد در محیط‌های متخلخل توصیه می‌شود.

تاریخ دریافت: ۱۴۰۴/۰۳/۱۰

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۴/۰۳/۲۸

تاریخ انتشار: ۱۴۰۴/۰۶/۳۱

کلیدواژه‌ها:

منحنی رخنه،

جذب دو مکانی،

ستون آزمایشگاهی،

مدل تعادلی،

مدل غیر تعادلی.

مقدمه

بررسی عملی و تئوری پدیده‌های مرتبط با انتقال املاح در محیط‌های متخلخل، به‌عنوان یکی از چالش‌برانگیزترین مسائل میان‌رشته‌ای در علوم خاک، هیدرولوژی و محیط زیست، طی دهه‌های اخیر مورد توجه گسترده پژوهشگران قرار گرفته است (Bear & Cheng, 2010). این مطالعات از حل تحلیلی معادلات پایه در دهه‌های ۱۹۵۰-۱۹۶۰ مثل حل تحلیلی معادله کلاسیک انتقال-پراکندگی (Bear, 1972; Freeze and Cherry, 1979) تا توسعه روش‌های پیشرفته آزمایشگاهی و مدل‌سازی عددی سه‌بعدی (Simunek et al., 2005) و ترکیب هوش مصنوعی با مدل‌سازی عددی تکامل یافته‌اند (Simunek et al., 2024). کاربردهای عملی این پژوهش‌ها در بهینه‌سازی آبیاری و کوددهی در کشاورزی (Shekhar et al., 2021) و همچنین مدیریت آلودگی آبخوان‌ها (Syafiuddin et al., 2020) به‌خوبی نشان‌دهنده اهمیت این حوزه تحقیقاتی است.

پیچیدگی‌های موجود در فرآیندهای حاکم بر انتقال املاح در محیط‌های متخلخل باعث شده بسیاری از مسائل مربوط به آنها همچنان ناشناخته بماند و پژوهشگران را ترغیب به انجام پژوهش‌های بیشتر در این مورد نماید. وجود این ناشناخته‌ها به‌همراه چالش‌های فزاینده‌ای که پژوهشگران با آن مواجه‌اند مانند تغییرات اقلیمی و افزایش فشار بر منابع آب زیرزمینی، محققان را به توسعه روش‌های نوین آزمایشگاهی و مدل‌سازی عددی پیشرفته ترغیب نموده است (Kulasiri, and Verwoerd, 2002). مدل‌سازی عددی انتقال املاح در خاک اولاً مستلزم ایجاد شرایط آزمایشگاهی کنترل شده‌ای است که بتواند پارامترهای مؤثر بر فرآیند انتقال را به‌دقت شبیه‌سازی نماید و ثانیاً نیازمند انتخاب مدل ریاضی مناسبی است که قادر به بازتولید رفتار دینامیکی سیستم باشد. این دو مؤلفه به‌عنوان ملزومات پایه در طراحی مطالعات انتقال آلاینده‌ها محسوب می‌شوند، به‌طوری‌که فقدان هر یک از آنها می‌تواند به بروز خطاهای سیستماتیک در نتایج پژوهش منجر گردد. به‌عنوان مثال تأثیر عدم‌یکنواختی هیدرولیکی محیط متخلخل یا وجود ناهمگنی در خصوصیات هیدرولیکی خاک (مانند سرعت جریان و هدایت هیدرولیکی اشباع) می‌تواند منجر به بروز

پدیده‌هایی نظیر جریان ترجیحی یا مناطق با نرخ متفاوت نفوذ شود که خود موجب خطای بیشتر در شبیه‌سازی غلظت املاح و جبهه نفوذ آن‌ها می‌شود (Simunek et al., 2016). از این‌رو، ایجاد شرایط هیدرولیکی یکنواخت و پایدار در آزمایش‌های خاک اشباع، به‌ویژه در محیط‌های شنی، امری ضروری برای افزایش دقت داده‌های ورودی و اعتبارسنجی مدل‌های عددی به‌شمار می‌رود. مطالعاتی که تحت شرایط هیدرولیکی یکسان انجام می‌شوند، نه‌تنها امکان شناخت بهتر فرآیندهای غالب فیزیکی را فراهم می‌کنند، بلکه بستری مناسب برای آزمون مدل‌های جذب نیز فراهم می‌آورند (Toride et al., 1999). از سویی دیگر، انتقال املاح محلول در خاک همواره تحت تأثیر ساختار فیزیکی خاک قرار دارد که یکی از مؤلفه‌های کلیدی آن اندازه ذرات است. اندازه ذرات مستقیماً بر تخلخل کل، توزیع منافذ، و هدایت هیدرولیکی اشباع اثر گذاشته و در نتیجه نحوه پخش، جذب، و حرکت املاح را دگرگون می‌کند (Rezaei et al., 2021). شرایط اشباع در خاک نیز، که در بسیاری از سناریوهای کشاورزی و آبخوان‌ها رایج است، رفتار انتقال املاح را نسبت به شرایط غیراشباع به‌طور قابل توجهی تغییر می‌دهد. در این شرایط، تمام خلل و فرج‌های خاک با آب پر شده‌اند، که این موضوع منجر به افزایش ضریب پخش و کاهش جذب سطحی برخی از املاح می‌گردد. بنابراین، ترکیب اثر اشباع‌بودن محیط و اندازه ذرات خاک می‌تواند الگوهای بسیار متفاوتی از انتقال املاح و شوری ایجاد کند که پیش‌بینی و شبیه‌سازی آن‌ها نیازمند مطالعات دقیق آزمایشگاهی و مدل‌سازی عددی است (Huang et al., 2023).

در حال حاضر برای پیش‌بینی و شبیه‌سازی انتقال املاح در خاک و بر اساس نوع فرآیندهای جذب و واجذب و دیگر خصوصیات محیط متخلخل، مدل‌های تخلخل یکنواخت (تعادلی و جذب تک مکانی و دو مکانی) و مدل‌های تخلخل غیریکنواخت (تخلخل دوگانه و نفوذپذیری دوگانه) توسعه داده شده‌اند، که مجموعه آن‌ها در نرم‌افزار HYDRUS-1D ارائه شده است. این برنامه به‌دلیل توانمندی شبیه‌سازی همزمان حرکت آب و انتقال آلاینده، قابلیت در نظر گرفتن انواع شرایط مرزی پیچیده و امکان مدل‌سازی واکنش‌های شیمیایی و جذب سطحی،

مدل جذب تک‌مکانی با افزودن یک ضریب نرخ جذب، توانست بهبودهایی در شبیه‌سازی دنباله‌های رخنه ایجاد کند، اما همچنان در شبیه‌سازی دقیق بخش‌های اولیه منحنی‌ها محدودیت‌هایی داشت. آنها گزارش کردند که مدل جذب دومکانی با در نظر گرفتن دو نوع سایت جذب (یکی تعادلی و دیگری با نرخ جذب محدود)، توانست به‌طور دقیق‌تری منحنی‌های رخنه را شبیه‌سازی کند و بهترین تطابق را با داده‌های آزمایشگاهی نشان داد. این نتایج توسط دیگر پژوهشگران تایید شد (Jellali et al., 2010; Ladu and Zhang, 2011; Florido et al., 2010; Urdiales et al., 2025).

با توجه به مطالب فوق مطالعه حاضر با هدف شبیه‌سازی انتقال املاح در سه محیط متخلخل اشباع و مقایسه‌ی مدل‌های جذب تعادلی، جذب تک‌مکانی و جذب دومکانی در HYDRUS-1D در مقیاس آزمایشگاهی انجام شد.

مواد و روش

جهت انجام آزمایش ستون‌های از جنس پی‌وی‌سی به طول ۲۵ سانتی‌متر و قطر داخلی ۸ سانتی‌متر تهیه شد. جهت ثبات دانه‌های محیط متخلخل، انتهای هر ستون با توری‌های نگهدارنده تجهیز شد. همزمان با پر کردن ستون‌ها، جریان آب از زیر ستون به درون ستون خاک اعمال شد تا ستون‌ها اشباع و هوای بین ذرات خارج شود. جنس محیط‌های متخلخل از ذرات شن و ماسه‌های طبیعی بود که مشخصات آن‌ها در جدول ۱ آمده است.

به‌عنوان یک ابزاری پرکاربرد در شبیه‌سازی‌ها مورد استفاده قرار گرفته است (Simunek et al., 2005).

بررسی منابع نشان داد برای شبیه‌سازی انتقال املاح در محیط HYDRUS-1D، مدل‌های جذب تعادلی، جذب تک‌مکانی و جذب دومکانی به‌دلیل تنوع ساده‌تر و ضرایب مجهول کمتر، بیش از سایر مدل‌ها توسط پژوهشگران به کار گرفته شده است (Bagheri et al., 2024). در مدل تعادلی فرض بر این است که املاح به‌صورت آنی در فازهای مایع و جامد به تعادل رسیده است (Wang et al., 2021) و بیشترین کاربرد آن در شبیه‌سازی املاح غیر واکنشی نظیر نیترات، کلراید و برماید است (Murphy et al., 2024). در مدل تک‌مکانی، کلیه مکان‌های جذبی در فاز جامد محیط به‌صورت کاملاً جنبشی و وابسته به زمان لحاظ شده و جذب آنی در آن نادیده گرفته شده است (Lee et al., 2012). مدل دومکانی بر این فرضیه استوار است که مکان‌های جذبی محیط متخلخل به دو بخش تعادلی و جنبشی قابل تقسیم بوده و فرآیندهای جذب آنی و زمان‌بر را همزمان شامل می‌شود (Finkel et al., 2016). سیمونک و ونگنوخن (Simunek, 2008 and van Genuchten) به بررسی و مقایسه مدل‌های جذب تعادلی، جذب تک‌مکانی و جذب دومکانی در شبیه‌سازی انتقال املاح در ستون‌های شنی اشباع پرداختند. نتایج نشان داد که مدل جذب تعادلی قادر به شبیه‌سازی اولیه ورود املاح به ستون خاک بود، اما در شبیه‌سازی دنباله‌های طولانی در منحنی‌های رخنه توانایی کافی را نداشت.

جدول ۱. خصوصیات فیزیکی و هیدرولیکی محیط‌های دانه‌ای در حین آزمایش.

Table 1. The Physical and Hydraulic Characteristics of The Grain Media During The Experiment.

خاک	قطر ذرات	چگالی ظاهری	تخلخل	سرعت آب	سرعت آب‌حفره‌ای	انتشارپذیری
soil	Particle Diameter	Bulk Density	Porosity	Water velocity	Pore water Velocity	Dispersivity
واحد	(mm)	(gr/cm ³)	(-)	(cm/min)	(cm/min)	(cm)
ریزدانه	0.6-1.2	1.35	0.49	1.35	2.76	0.53
Fine-Grained						
متوسط دانه	1.2-2.4	1.38	0.47	1.35	2.88	1.50
Medium-Grained						
درشت‌دانه	2.4-4.8	1.49	0.44	1.35	3.09	0.72
Coarse-Grained						

۱ سانتی‌متری آب روی سطح خاک هر ستون ثابت نگه‌داشته شد. لذا، سرعت متوسط جریان در همه ستون‌ها برابر گردید که در جزئیات آن در جدول (۱) ارائه شده است. در طول آزمایش به‌طور منظم نمونه‌های آب خروجی از ستون‌ها در فواصل زمانی ۲ دقیقه‌ای جمع‌آوری و میزان شوری آن (TDS) با دستگاه شوری سنج مدل هانا HI2300 اندازه‌گیری شد.

برای شبیه‌سازی منحنی رخنه‌ی شوری از معادله‌ی انتقال-انتشار در نرم‌افزار HYDRUS-1D استفاده شد.

پارامترهای این معادله به‌صورت زیر است؛

است $[T-1]$. در حالت $F=1$ مدل تعادلی بوده و تنها KD مجهول است. در حالت $F=0$ ، مدل جذب تک‌مکانی بوده و KD و α مجهول است. در حالت $F>1$ ، مدل جذب دومکانی بوده و ضرایب KD ، α و F مجهول است. با توجه به اینکه مدل به مقدار اولیه پیشنهادی برای اجرا شدن حساس می‌باشد، لذا، جهت اطمینان از نتایج شبیه‌سازی، چندین دفعه ضرایب اولیه مدل‌ها تغییر داده شد تا تابع خطا حداقل شود. همچنین، آماره حداقل میانگین مربعات خطا (RMSE) جهت مقایسه دقت مدل‌ها به کار گرفته شد.

نتایج و بحث

منحنی‌های رخنه اندازه‌گیری و شبیه‌سازی در شکل‌های ۱ تا ۳ آمده است. تحلیل نتایج نشان داد به‌رغم شیب هیدرولیکی و دبی ورودی یکسان در هر سه محیط متخلخل، موج خروجی از محیط درشت‌دانه و متوسط دانه ($PV=0/5$) زودتر از محیط ریزدانه ($PV=0/75$) نمایان شد که متأثر از سرعت آب‌حفره‌ای بیشتر و حفرات درشت‌تر بود (جدول ۱). همچنین، بیشینه‌ی غلظت خروجی از محیط‌های ریز، متوسط و درشت‌دانه به‌ترتیب در حجم حفره‌ای برابر با $1/2$ ، $1/4$ و $1/75$ به مقدار $0/5$ ، $0/26$ و $0/29$ بود. مقایسه‌ی شکل‌های ۱، ۲ و ۳ نشان داد شیب بخش بالارونده منحنی محیط ریزدانه تندتر از دو محیط دیگر بود که نشان‌دهنده‌ی یکنواختی بیشتر اندازه حفرات در محیط ریزدانه بود. کمتر بودن مقادیر انتشارپذیری در محیط ریزدانه (جدول ۱) نیز مؤید همین نتیجه است (Bagheri et al., 2019). وقوع دیرتر بیشینه‌ی غلظت در محیط‌های درشت‌دانه متأثر از فاصله گرفتن

پیش از آغاز آزمایش، ستون‌ها به‌طور متوالی با محلول $0/1$ مول بر لیتر H_2SO_4 و آب دیونیزه شستشو داده شدند تا هرگونه آلودگی احتمالی حذف گردد. بلافاصله پس از اتمام فرآیندهای آب‌شویی اولیه و اشباع‌سازی ستون خاک، 180 سانتی‌متر مکعب آب مقطر حاوی 1 میلی مول نیترات پتاسیم توسط پمپ پریستالتیک به ستون‌ها تزریق شد و بلافاصله عملیات آب‌شویی با آب دیونیزه شروع شد. در حین آزمایش شدت جریان ورودی به همه ستون‌ها یکسان و برابر با $75 \text{ cm}^3/\text{min}$ بود که به‌کمک شیر تنظیم تعبیه‌شده در انتهای هر ستون، ارتفاع

$$\frac{\partial \theta C}{\partial t} + \rho \left(\frac{\partial S}{\partial t} \right) = \lambda v \theta \frac{\partial^2 C}{\partial Z^2} - v \theta \frac{\partial C}{\partial Z} \quad (1)$$

در معادله‌ی فوق، C [ML-3] غلظت املاح، θ [L3L-3] رطوبت خاک، S [MM-1] غلظت املاح جذب شده توسط محیط متخلخل، ρ [ML-3] چگالی ظاهری خاک، λ [L] ضریب انتشارپذیری و v [LT-1] سرعت متوسط جریان می‌باشد. ضریب انتشارپذیری در این معادله به‌کمک منحنی رخنه نیترات به‌دست آمده و در جدول ۱ آورده شده است. جهت تعیین جمله جذب معادله فوق $(\partial S / \partial t)$ از سه مدل تعادلی، جذب تک‌مکانی و دو مکانی مطابق روابط زیر استفاده شده است. روابط کلی حاکم بر این سه مدل به شرح زیر است؛

$$S = S_1 + S_2 \quad (2)$$

$$S_1 = F K_D C \quad (3)$$

$$S_2 = (1-F) K_D C \quad (4)$$

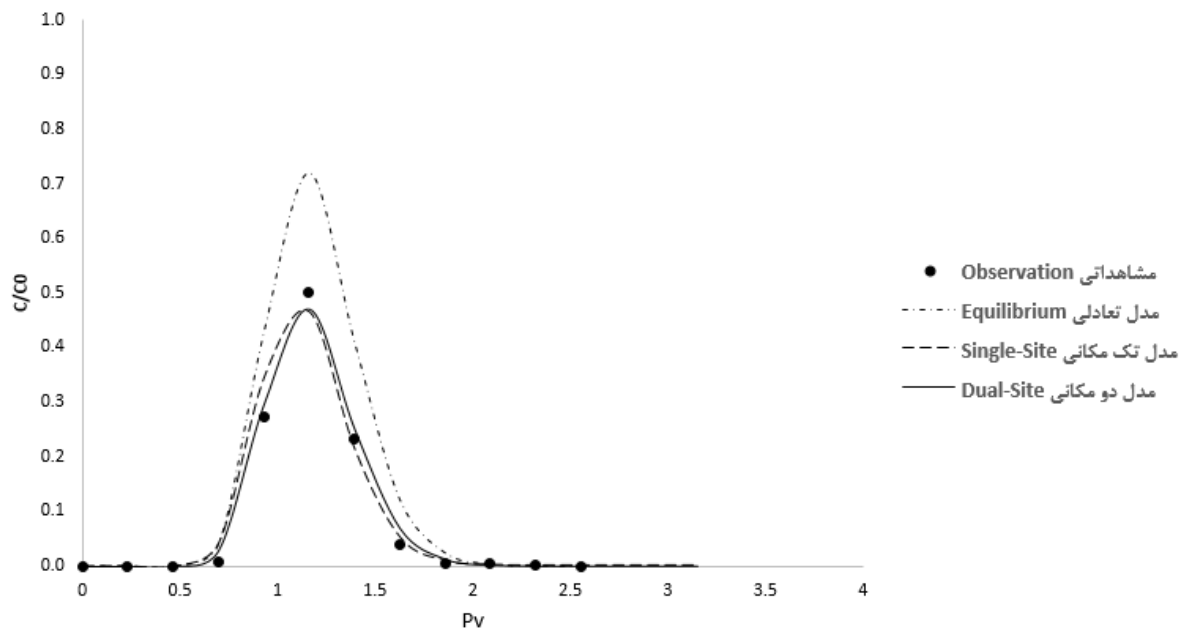
$$\frac{\partial S_1}{\partial t} = F K_D \frac{\partial C}{\partial t} \quad (5)$$

$$\frac{\partial S_2}{\partial t} = \alpha [(1-F) K_D C - S_2] \quad (6)$$

در این معادلات S_1 و S_2 به‌ترتیب غلظت املاح در مکان‌های نوع اول و دوم [M.M-1]، F و $(F-1)$ به‌ترتیب کسر تبدیلی بدون بعد مکان‌های نوع اول و دوم $(-)$ ، KD ضریب توزیع املاح [L.M-1] و α ضریب شدت درجه اول

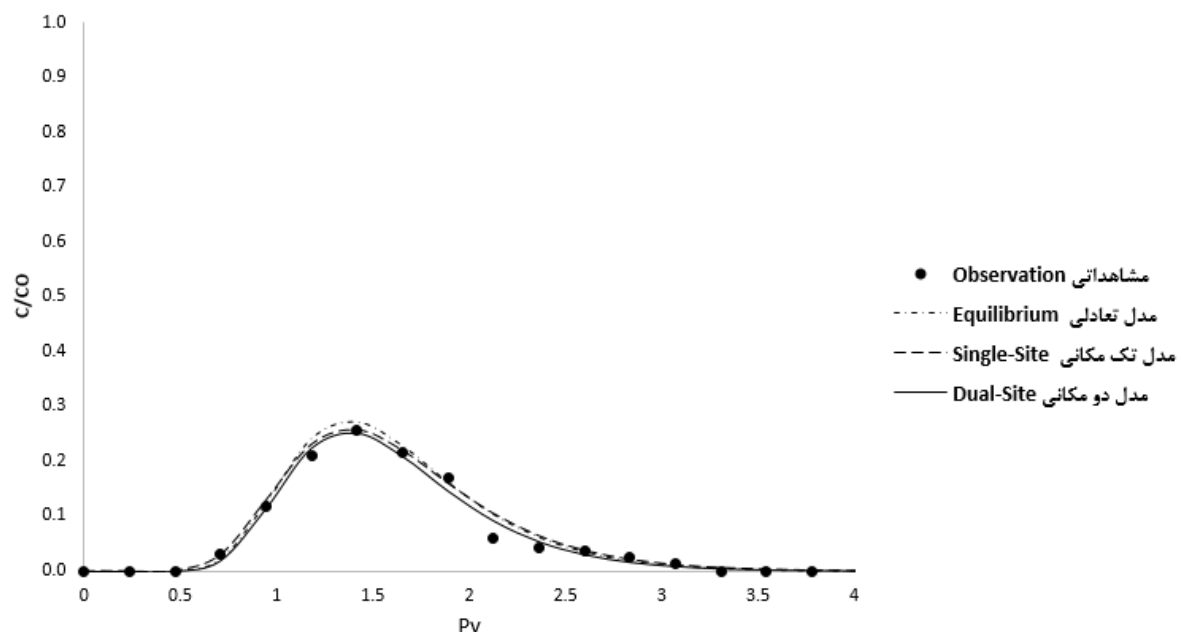
نقطه اوج منحنی‌ها مصرف ۰/۶، ۱/۹ و ۱/۲۵ حجم آب‌حفره‌ای جهت اتمام دنباله آلودگی را آشکار می‌کند. این نتایج دنباله کشیده منحنی و تأخیر در پاک‌سازی محیط متوسط‌دانه را نشان داد که نمایان‌کننده‌ی نقش وجود تعداد زیادی از مجاری باریک در مقایسه با حفرات درشت در این محیط بود.

زبانۀ پیشروی سریع آلودگی در حفرات درشت در مقایسه با زبانۀ‌های عقب‌افتاده در مجاری باریک بوده که سبب رقیق شدن جبهه پیشروی آلودگی به کمک جریان‌ات جانبی و موازی است (Batany et al., 2019). زمان اتمام رخنه در محیط‌های ریز، متوسط و درشت‌دانه به‌ترتیب در حجم حفره‌ای ۱/۸، ۳/۳ و ۳ مشاهده شد، که در مقایسه با



شکل ۱. منحنی‌های رخنه شبیه‌سازی شده در سه مدل تعادلی، تک‌مکانی و دومکانی در خاک ریزدانه.

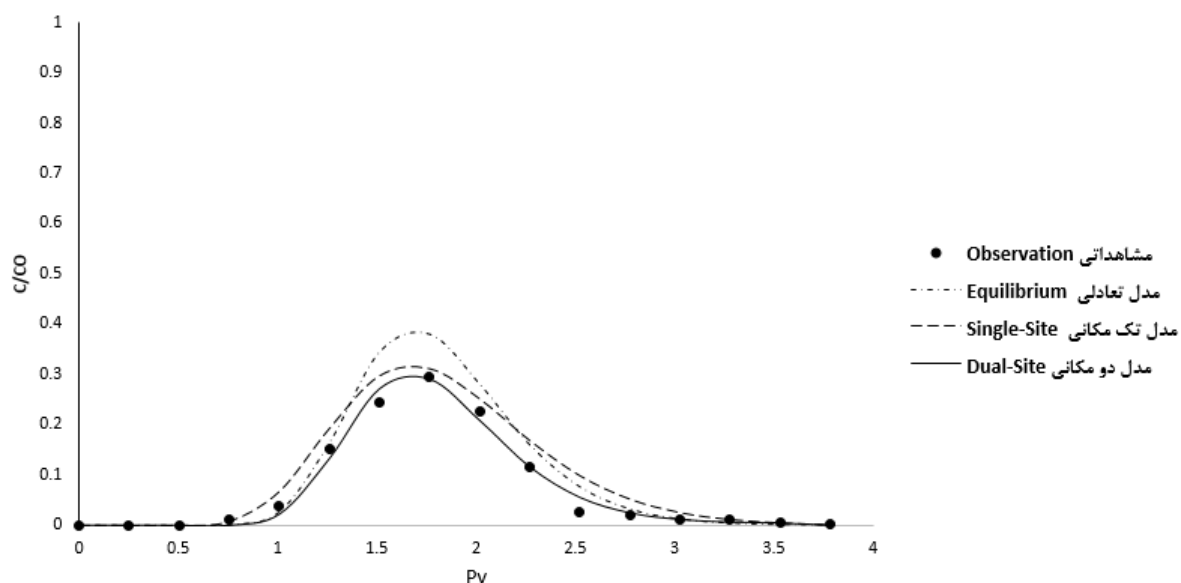
Fig 1. Simulated Breakthrough Curves in Three Models: Equilibrium, Single-Location, and Two-Location in Fine-Grained Soil.



شکل ۲. منحنی‌های رخنه شبیه‌سازی شده در سه مدل تعادلی، تک‌مکانی و دومکانی در خاک متوسط‌دانه.

Fig 2. Simulated Breakthrough Curves in Three Models: Equilibrium, Single-Location, and Two-

Location in Medium-Grained Soil.



شکل ۳. منحنی‌های رخنه شبیه‌سازی شده در سه مدل تعادلی، تک‌مکانی و دومکانی در خاک درشت‌دانه.

Fig 3. Simulated Breakthrough Curves in Three Models: Equilibrium, Single-Location, and Two-Location in Coarse-Grained Soil.

به‌صورت توأمان است. از این رو، به‌کارگیری مکانیسم‌های چندگانه‌ی جذب در شبیه‌سازی انتقال املاح به‌منظور ارتقا دقت و درک صحیح از نوع و شدت فرآیندهای مؤثر در انتقال املاح توصیه می‌شود (Jellali et al., 2010; Simunek and van Genuchten, 2008; Simunek et al., 2018).

با توجه به نتایج دقت مدل‌ها، تحلیل ضرایب به‌دست آمده از مدل جذب دو مکانی جهت درک بهتر فرآیندهای مؤثر در جابه‌جایی املاح نسبت به دو مدل دیگر مهم‌تر و منطقی‌تر است. مقادیر کسر مکان‌های تعادلی (F) در محیط‌های ریز، متوسط و درشت‌دانه به‌ترتیب $0/005$ ، $0/07$ و $0/09$ بود (جدول ۲). لذا، سهم مکان‌های جذب و واجذب تعادلی در این سه محیط به‌ترتیب $0/05$ ، 7 و 9% بود که نشان‌دهنده برجسته بودن نقش فرآیندهای جنبشی در انتقال املاح است. نتایج باقری و همکاران (Bagheri et al., 2024) نیز نشان‌دهنده پررنگ بودن نقش مکان‌های جنبشی در مقابل مکان‌های تعادلی در انتقال نیتрат و مواد آلی محلول بود.

ضرایب توزیع (KD) در سه محیط ریز، متوسط و درشت‌دانه به‌ترتیب $23/2$ ، $2/43$ و $2/41$ لیتر بر کیلوگرم بود که نشان می‌دهد محیط ریزدانه به‌دلیل داشتن حفرات ریز غیرفعال و سطح تماس بیشتر با املاح، قدرت جذب

نتایج مربوط به میزان دقت منحنی‌های شبیه‌سازی در جدول ۱ آمده است. مطابق آن، مقادیر آماری RMSE برای مدل تعادلی، جذب تک مکانی و جذب دو مکانی به‌ترتیب $0/09-0/01$ ، $0/03-0/01$ و $0/01$ بود که نشان دهنده دقت بالاتر مدل جذب دو مکانی است. نتایج مطالعه اوردیالز و همکاران نیز مبین دقت بیشتر مدل دومکانی بود (Urdiales et al; 2025). مقایسه‌ی منحنی‌های شبیه‌سازی نشان‌دهنده ضعیف و بیش‌برآوردی مدل تعادلی در تمام نقاط رخنه محیط‌های ریزدانه و درشت‌دانه (شکل‌های ۱ و ۳) و دقت نسبتاً پایین در نقطه اوج و بخشی از دنباله منحنی بستر متوسط‌دانه است (شکل ۲). مدل جذب تک‌مکانی در محیط‌های ریزدانه و متوسط دانه دقت بسیار مشابهی با مدل جذب دو مکانی داشت و روند تغییرات منحنی را به‌درستی شبیه‌سازی نمود اما در محیط درشت‌دانه از دقت مناسبی برخوردار نبود و منحنی تولیدی آن منطبق بر نتایج آزمایشگاهی نبود. مدل جذب دو مکانی در هر سه محیط، در مقایسه با دو مدل دیگر علاوه بر شبیه‌سازی درست روند تغییرات منحنی اندازه‌گیری، دقت بالاتری از دو مدل دیگر داشت لذا می‌توان نتیجه گرفت که فرآیند جذب و رهاسازی املاح در این محیط‌ها از نوع تعادلی و جنبشی

بیشتر واکنش‌های جذب و واجذب در محیط درشت‌دانه ناشی از وجود حفرات و کانال‌های بزرگ‌تر و رقیق‌تر بودن فاز مایع در این محیط است (شکل ۳). باقری و همکاران (Bagheri et al., 2024) گزارش دادند که املاح با غلظت کمتر در محیط متخلخل ضریب α را افزایش می‌دهد.

بالاتری در نگهداشت املاح نسبت به دو محیط دیگر دارد (Yu et al., 2023).

مقادیر ضریب شدت درجه اول (α) مربوط به مکان‌های جنبشی در محیط ریز، متوسط و درشت‌دانه برابر ۰/۰۰۰۸، ۰/۰۱۸ و ۰/۰۵۱ بر دقیقه بود که مبین شدت

جدول ۲. ضرایب حاصل از شبیه‌سازی منحنی رخنه در سه بافت خاک.

Table 2. Coefficients Obtained From Simulating Breakthrough Curves in Three Soil Textures.

مدل جذب دو مکانی Dual-Site Model				مدل جذب تک مکانی Single-Site Model			مدل تعادلی Equilibrium Model		خاک Soil
RMSE	α (1/min)	KD (lit/kg)	F (-)	RSME	α (1/min)	KD (lit/kg)	RSME	KD (lit/kg)	
0.01	0.0008	23.2	0.0005	0.02	0.002	9.5	0.09	0.01	ریز دانه Fine-grained
0.01	0.018	2.43	0.07	0.01	5.93	0.18	0.01	0.18	متوسط دانه Medium-grained
0.01	0.051	2.42	0.09	0.03	2.24	0.22	0.04	0.21	درشت‌دانه Coarse-grained

توسط چندین گروه پژوهشی تأیید شده است. این یافته‌ها اهمیت انتخاب مدل‌های پیشرفته‌تر را در شبیه‌سازی انتقال آلاینده‌ها در محیط‌های متخلخل، به‌ویژه در مواردی که دقت پیش‌بینی از اهمیت بالایی برخوردار است، برجسته می‌سازد.

منابع

- Bagheri, H., Abyaneh, H. Z., Izady, A., & Brusseau, M. L. (2019). Modeling the transport of nitrate and natural multi-sized colloids in natural soil and soil amended with vermicompost. *Geoderma*, 354, 113889. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2019.113889>
- Bagheri, H., Zare Abianeh, H., Izadi, A., and Bagheri, H. (2024). Simulation of the effect of vermicompost on the transport of reactive sodium in saturated and near-saturated soil. *Iranian Water Research Journal*, 17(4). <https://doi.org/10.22034/iwrj.2023.14379.2524>. (In Persian)
- Batany, S., Peyneau, P. E., Lassabatère, L., Béchet, B., Faure, P., & Dangla, P. (2019). Interplay between molecular diffusion and advection during solute transport in macroporous media. *Vadose Zone Journal*, 18(1), 1-15. <https://doi.org/10.2136/vzj2018.07.0140>
- Bear, J. (2013). *Dynamics of fluids in porous media*. Courier Corporation.
- Bear, J., & Braester, C. (1972). On the flow of two immiscible fluids in fractured porous media. In

نتیجه‌گیری

مطالعه حاضر با هدف بررسی آزمایشگاهی و شبیه‌سازی جابه‌جایی مواد محلول در سه محیط متخلخل ریزدانه، متوسط‌دانه و درشت‌دانه در حالت اشباع تحت شرایط هیدرولیکی یکسان انجام شد. نتایج این پژوهش نشان داد با افزایش قطر ذرات بستر، بیشینه‌ی غلظت در حجم منفذی بالاتری اتفاق افتاد که متأثر از فاصله گرفتن زبانه پیشروی سریع آلودگی در حفرات درشت در مقایسه با زبانه‌های عقب افتاده در مجاری باریک است. همچنین نتایج نشان داد دقت مدل دومکانی در هر سه بافت خاک بیش از دیگر مدل‌هاست و مدل تک‌مکانی در جایگاه دوم قرار دارد. هر چند مدل تعادلی با رویکرد ساده‌تری که دارد نسبت به دو مدل دیگر از دقت کافی برای توصیف و شبیه‌سازی منحنی رخنه برخوردار نبود اما در برخی شرایط خاص (مانند خاک متوسط‌دانه)، می‌تواند برآوردهای اولیه خوبی از پیش‌بینی منحنی رخنه ارائه دهد.

مقایسه‌های انجام‌شده نشان داد که اگر چه جزئیات عددی ممکن است در مطالعات مختلف متفاوت باشد، اما الگوی کلی برتری مدل دومکانی در محیط‌های متخلخل اشباع با جریان نسبتاً سریع، نتیجه‌ای است که به‌طور مستقل

- An experimental study. *arXiv preprint arXiv:2111.01288*.
<https://doi.org/10.48550/arXiv.2111.01288>
- Shekhar, S., Mailapalli, D. R., & Raghuwanshi, N. S. (2024). Simulation and optimization of ponding water and nutrient management in rice irrigated with alternate wetting and drying practice under a humid subtropical region in India. *Paddy and Water Environment*, 22(1), 189-207.
<https://doi.org/10.1007/s10333-023-00961-7>
- Simunek, J., & van Genuchten, M. T. (2008). Modeling nonequilibrium flow and transport processes using HYDRUS. *Vadose zone journal*, 7(2), 782-797.
<https://doi.org/10.2136/vzj2007.0074>
- Simunek, J., Brunetti, G., Jacques, D., van Genuchten, M. T., & Šejna, M. (2024). Developments and applications of the HYDRUS computer software packages since 2016. *Vadose Zone Journal*, 23(4), e20310.
<https://doi.org/10.1002/vzj2.20310>
- Simunek, J., Van Genuchten, M. T., & Šejna, M. (2005). The HYDRUS-1D software package for simulating the one-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably-saturated media. *University of California-Riverside Research Reports*, 3, 1-240.
- Simunek, J., Van Genuchten, M. T., & Šejna, M. (2016). Recent developments and applications of the HYDRUS computer software packages. *Vadose Zone Journal*, 15(7), vzj2016-04.
<https://doi.org/10.2136/vzj2016.04.0033>
- Syafiuddin, A., Boopathy, R., & Hadibarata, T. (2020). Challenges and solutions for sustainable groundwater usage: Pollution control and integrated management. *Current Pollution Reports*, 6, 310-327. <https://doi.org/10.1007/s40726-020-00167-z>
- Urdiales, C., Urdiales-Flores, D., Tapia, Y., Cáceres-Jensen, L., Šimunek, J., & Antilén, M. (2025). Transport mechanisms of the anthropogenic contaminant sulfamethoxazole in volcanic ash soils at equilibrium pH evaluated using the HYDRUS-1D model. *Journal of Hazardous Materials*, 487, 137077.
<https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2024.137077>
- Wang, S., Huang, L., Zhang, Y., Li, L., & Lu, X. (2021). A mini-review on the modeling of volatile organic compound adsorption in activated carbons: Equilibrium, dynamics, and heat effects. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 31, 153-163.
<https://doi.org/10.1016/j.cjche.2020.11.018>
- Yu, H., Li, C., Yan, J., Ma, Y., Zhou, X., Yu, W.,... & Dong, P. (2023). A review on adsorption characteristics and influencing mechanism of heavy metals in farmland soil. *RSC advances*, 13(6), 3505-3519. <https://doi.org/10.1039/D2RA07095>
- Developments in soil science (Vol. 2, pp. 177-202). Elsevier.
- Bear, J., & Cheng, A. H. D. (2010). *Modeling groundwater flow and contaminant transport* (Vol. 23, p. 834). Dordrecht: Springer.
<https://doi.org/10.1007/978-1-4020-6682-5>
- Finkel, M., Grathwohl, P., & Cirpka, O. A. (2016). A travel time-based approach to model kinetic sorption in highly heterogeneous porous media via reactive hydrofacies. *Water Resources Research*, 52(12), 9390-9411.
<https://doi.org/10.1002/2016WR019147>
- Florido, A., Valderrama, C., Arévalo, J. A., Casas, I., Martínez, M., & Miralles, N. (2010). Application of the site's non-equilibrium sorption model for the removal of Cu (II) onto grape stalk wastes in a fixed-bed column. *Chemical Engineering Journal*, 156(2), 298-304.
<https://doi.org/10.1016/j.ccej.2009.10.020>
- Freeze, R. A., & Cherry, J. A. (1979). *Groundwater prentice. Englewood Cliffs, Englewood Cliffs*.
- Jellali, S., Diamantopoulos, E., Kallali, H., Bennaceur, S., Anane, M., & Jedidi, N. (2010). Dynamic sorption of ammonium by sandy soil in fixed bed columns: Evaluation of equilibrium and non-equilibrium transport processes. *Journal of Environmental Management*, 91(4), 897-905.
<https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2009.11.006>
- Kulasiri, D., & Verwoerd, W. (2002). Modeling Solute Transport in Porous Media. In *North-Holland series in applied mathematics and mechanics* (Vol. 44, pp. 1-25). North-Holland.
[https://doi.org/10.1016/S0167-5931\(02\)80002-X](https://doi.org/10.1016/S0167-5931(02)80002-X)
- Ladu, J. L. C., & Zhang, D. R. (2011). Modeling atrazine transport in soil columns with HYDRUS-1D. *Water Science and Engineering*, 4(3), 258-269.
<https://doi.org/10.3882/j.issn.1674-2370.2011.03.003>
- Lee, S., Kim, D. J., & Choi, J. W. (2012). Comparison of first-order sorption kinetics using the concept of the two-site sorption model. *Environmental Engineering Science*, 29(11), 1002-1007. <https://doi.org/10.1089/ees.2011.0301>
- Li, Q., LI, F., ZHANG, Q., QIAO, Y., Du, K., Zhu, N.,... & HE, X. (2021). Water and salt transport simulation in the wheat growing area of the North China Plain based on the HYDRUS model. *Chinese Journal of Eco-Agriculture*, 29(6), 1085-1094.
<https://doi.org/10.13930/j.cnki.cjea.200828>
- Murphy, N. P., Furman, A., Moshe, S. B., & Dahlke, H. E. (2024). Comparison of reactive transport and non-equilibrium modeling approaches for the estimation of nitrate leaching under large water application events. *Journal of Hydrology*, 628, 30583.
<https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2023.130583>
- Rezaei, E., Zeinalzadeh, K., & Ghanbarian, B. (2021). Effects of particle shape and size distribution on hydraulic properties of grain packs: