Original Article

Journal of Aquifer and Qanat

Spring and Summer 2025, Vol. 6, No. 1, pp 41-50

10.22077/jaaq.2025.9512.1114

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

Saeed Ghaedi[1] | Peyman Afrasiab[2,✉] |Masoumeh Debari[2] | Hossein Bagheri[3]

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 _afrasiab@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 cm^3 of distilled water containing 1 mmol of potassium nitrate (KNO_3) 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 the 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 strongest 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 of the processes involved in solute transport.

مقاله پژوهشی

مجله
آبخوان و قنات

دوره ششم، شماره اول، بهار و تابستان ۱۴۰۴، صفحات ۵۰-۴۱

10.22077/jaaq.2025.9512.1114

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[۳]

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_afrasiab@yahoo.com

تاریخ دریافت: ۱۴۰۴/۰۳/۱۰
تاریخ پذیرش: ۱۴۰۴/۰۳/۲۸
تاریخ انتشار: ۱۴۰۴/۰۶/۳۱

کلیدواژه‌ها:
منحنی رخنه، جذب دومکانی، ستون آزمایشگاهی، مدل تعادلی، مدل غیر تعادلی.

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 آب حفره‌ای است. ازاین‌رو، برای شناخت بهتر ضرایب جذب و واجذب و فرایندهای 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 غیرتعادلی 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 ماسه طبیعی بود. نیترات پتاسیم به‌صورت تزریق مقطعی به‌عنوان ماده محلول به ستون‌های خاک تزریق شد. مطابق نتایج آزمایشگاهی، بیشینه غلظت (C/C0) در محیط‌های ریز، متوسط و درشت‌دانه به ترتیب برابر ۰/۵، ۰/۲۷ و ۰/۳ و ضرایب توزیع آن‌ها (KD) به ترتیب ۲۳/۲، ۱/۸ و ۲/۱ lit/kg که نشان‌دهنده رقیق‌شدن آلاینده‌ها در محیط‌های درشت‌دانه و نگهداشت آنها در محیط‌های ریزدانه است. نتایج شبیه‌سازی نشان‌دهنده دقیق‌تر بودن مدل‌های غیرتعادلی دومکانی (RMSE=0.01) و تک‌مکانی (RMSE=0.01- 0.03) در مقایسه با مدل تعادلی (RMSE=0.01-0.09) بود که مبین وجود فرایندهای جنبشی زمان‌بر در فرایندهای انتقال املاح است؛ لذا، استفاده از مدل‌های مشمول فرایند جنبشی و تعادلی در شبیه‌سازی انتقال مواد در محیط‌های متخلخل توصیه می‌شود.

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 and 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 به خوبی نشان‌دهنده اهمیت این حوزه تحقیقاتی است.

پیچیدگی‌های موجود در فرایندهای 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 به همراه 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 فرایند انتقال را به دقت 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، به‌طوری که فقدان هر یک از آنها می‌تواند به بروز خطاهای سیستماتیک در نتایج پژوهش منجر گردد. به‌عنوان مثال تأثیر عدم یکنواختی 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 به شمار می‌رود. مطالعاتی که تحت شرایط هیدرولیکی یکسان انجام می‌شوند، نه‌تنها امکان شناخت بهتر فرایندهای 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 به طور 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 اشباع بودن 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 فرایندهای جذب و واجذب و دیگر خصوصیات محیط متخلخل، مدل‌های تخلخل یکنواخت (تعادلی و جذب تک مکانی و دومکانی) 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 درنظرگرفتن انواع شرایط مرزی پیچیده و امکان مدل‌سازی واکنش‌های شیمیایی و جذب سطحی، به‌عنوان یک ابزاری پرکاربرد در شبیه‌سازی‌ها مورد استفاده قرار گرفته است (Simunek et al., 2005). جهت شبیه‌سازی

انتقال املاح در محیط HYDRUS-1D، مدل‌های جذب تعادلی، جذب تک مکانی و جذب دومکانی به دلیل تئوری ساده‌تر و ضرایب مجهول کمتر، بیش از سایر مدل‌ها 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 تک مکانی، 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 فرایندهای جذب آنی و زمان‌بر را هم‌زمان شامل می‌شود (Finkel et al., 2016). سیمونک و ونگنوخن (Simunek and van Genuchten, 2008) در بررسی مدل‌های مختلف در ستون‌های شنی اشباع نتیجه گرفتند که مدل جذب تعادلی قادر به شبیه‌سازی اولیه ورود املاح به ستون خاک بود، اما در شبیه‌سازی دنباله‌های منحنی رخنه ضعیف بود. طبق همین مطالعه، به‌کارگیری مدل جذب شبیه‌سازی دنباله‌های رخنه را ارتقا داد، اما همچنان در شبیه‌سازی دقیق بخش‌های اولیه منحنی‌ها محدودیت‌هایی داشت. به‌علاوه، مدل جذب دومکانی با در نظرگرفتن دو پدیده جذب/واجذب تعادلی و غیرتعادلی، توانست به‌طور دقیق‌تری منحنی‌های رخنه را شبیه‌سازی کرده که توسط دیگر پژوهشگران تأیید شد (Ladu and Zhang, 2011; Urdiales et al., 2025; Florido et al., 2010)؛ لذا، هدف مطالعه حاضر، ارزیابی توانایی مدل‌های جذب تعادلی، جذب تک مکانی و جذب دومکانی در شبیه‌سازی انتقال املاح در محیط‌های متخلخل اشباع است.

مواد و روش

جهت انجام آزمایش ستون‌هایی 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 پرکردن 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. پیش از آغاز آزمایش، ستون‌ها به‌طور متوالی با محلول ۰/۱ مول بر لیتر H_2SO_4 و آب دیونیزه شستشو داده شدند تا هرگونه آلودگی احتمالی حذف گردد.

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 soil	قطر ذرات Particle Diameter (mm)	چگالی ظاهری Bulk Density (gr/cm^3)	تخلخل Porosity	سرعت آب Water velocity (cm/min)	سرعت آب حفره‌ای Pore waterr Velocity (cm/min)	انتشارپذیری Dispersivity (cm)
Fine grain	0.6-1.2	1.35	0.49	1.35	2.76	0.53
Medium grain	1.2-2.4	1.38	0.47	1.35	2.88	1.50
Coarse grain	2.4-4.8	1.49	0.44	1.35	3.09	0.72

بلافاصله پس از اتمام فرایندهای آبشویی اولیه و اشباع‌سازی ستون خاک، ۱۸۰ سانتی‌متر مکعب آب مقطر حاوی ۱ 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 cm^3/min ۷۵ بود که به‌کمک شیر تنظیم تعبیه‌شده در انتهای هر ستون، ارتفاع 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 به طور 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 که یک مدل پیشرفته و پرکاربرد در شبیه‌سازی حرکت آب و املاح در خاک است. پارامترهای این معادله به‌صورت رابطه ۱ است:

$$\frac{\partial \theta C}{\partial t}+\rho\left(\frac{\partial S}{\partial t}\right)=\lambda v\theta\frac{\partial^2 C}{\partial Z^2}-v\theta\frac{\partial C}{\partial Z} \quad (۱)$$

در معادلـه فـوق، C [ML-3] غلظـت امـلاح، θ [L3L-3] رطوبت خاک، S [MM-1] غلظت املاح جذب شده توسط محیط متخلخل، ρ [ML-3] چگالی ظاهری خـاک، λ [L] ضریب انتشارپذیری و υ [LT-1] سـرعت متوسـط جریـان می‌باشد. ضـریب انتشـارپذیری در ایـن معادلـه بـه کمـک منحنی رخنه نیترات به دست آمـده و در جـدول ۱ آورده شده است.

جهت تعیین جمله جذب معادله فوق ($\partial S/\partial t$) از سه مـدل تعادلی، جذب تک مکانی و دو مکـانی مطـابق روابـط زیـر استفاده شده است. روابط کلی حاکم بر این سـه مـدل بـه شرح روابط ۲ تا ۵ است:

$$S = S_1 + S_2 \quad (۲)$$

$$S_1 = FK_D C \quad (۳)$$

$$S_2 = (1-F)K_D C \quad (۴)$$

$$\frac{\partial S_1}{\partial t} = FK_D\frac{\partial C}{\partial t} \quad (۵)$$

در ایـن معـادلات S_1 و S_2 بـه ترتیـب غلظـت امـلاح در مکان‌های نوع اول و دوم [$M.M^{-1}$]، F و (1-F) بـه ترتیـب کسر تبادلی بدون بعد مکان‌هـای نـوع اول و دوم (-)، KD ضریب توزیع املاح [$L.M^{-1}$] و α ضریب شدت درجـه اول است [T^{-1}]. در حالت F=1 مدل تعـادلی بـوده و تنهـا KD مجهول است. در حالت F=0، مدل جذب تک‌مکانی بوده و KD و α مجهـول اسـت. در حالـت 0<F<1، مـدل جـذب دومکانی بوده و ضرایب KD، α و F مجهول است.

شرایط اولیه پروفیل خاک شامل چگالی ظـاهری، سـرعت آب حفره‌ای و تخلخل (اندازه‌گیری‌شده بر اسـاس رطوبـت اشباع به روش وزنی) در مـدل لحـاظ گردیـد (جـدول ۱). همچنین، برای شبیه‌سازی حرکت املاح در ستون خـاک، از شـرط مـرزی جریـان ثابـت در مـرز بالادسـت و شـرط زهکشی آزاد در مرز پایین‌دست استفاده شد.

با توجه به این‌که مدل بـه مقـدار اولیـه پیشـنهادی بـرای اجراشدن حساس می‌باشد، لـذا، جهـت اطمینـان از نتـایج شبیه‌سازی، چندین بار ضرایب اولیه مدل‌ها تغییر داده شد تا تابع خطا حداقل گردید. بـرای انتخـاب صـحیح ضـرایب اولیه پیشنهادی و به حداقل رساندن تابع خطا از تجربیـات بـاقری و همکـاران (Bagheri et al., 2019) و بـاقری و همکاران (Bagheri et al., 2024) استفاده شد. با توجه بـه اینکه مقدار پارامتر F در بازه صفر تا یک تعریـف می‌شـود، مقادیر مختلفـی کمتـر و بیشـتر از ۰/۵ بـه مـدل معرفـی گردید تا مقدار تابع خطا به حداقل ممکن برسد. همچنین با استناد به مطالعات پیشین که نشان دادند مقادیر پارامتر α بسیار کوچک هستند، مقادیر کمتر از ۰/۰۱ بـرای ایـن پارامتر در فرایند شبیه‌سازی منحنی رخنه بـه مـدل ارائـه شد. برای ضریب توزیـع KD نیـز، مقـادیر متنـوعی در دو سوی عدد یک (کمتر و بیشتر از ۱) به مـدل داده شـد تـا بهترین برازش و کمترین مقـدار تـابع خطـا حاصـل شـود. همچنـین، آمـاره‌هـای حـداقل میـانگین مربعـات خطـا (RMSE)، جرم باقیمانده (CRM) و ضـریب تعیـین (R2) جهت مقایسه دقت مدل‌ها به کـار گرفتـه شـد. همچنـین برای ارزیابی میزان تأثیر تغییر ضرایب مدل بر شبیه‌سازی منحنی رخنه، تحلیل حساسیت انجام گرفت. در این راستا، برای هر ضریب مورد بررسی، سایر پارامترهای مـدل ثابـت نگه داشته شد و تنها ضریب هدف در بازه‌ای معـادل ±۳۰ درصد مقدار پایه تغییر داده شـد (Bagheri et al., 2019). سپس با اسـتفاده از رابطـه ۱۰، مقـدار ضـریب حساسـیت مربوط به هر پارامتر محاسبه گردید.

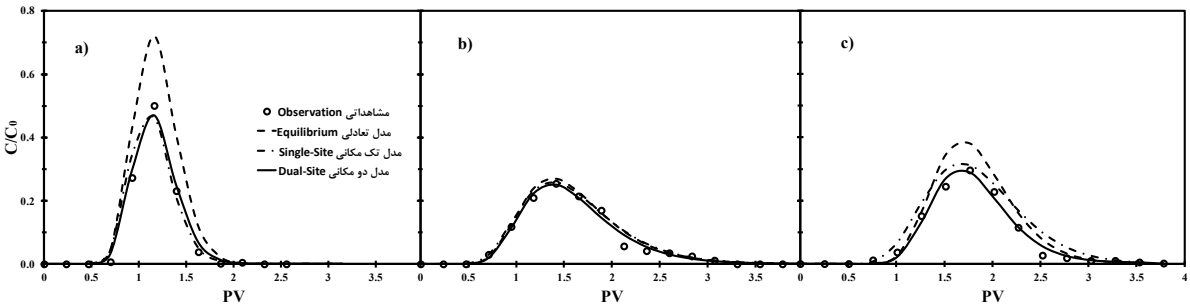
$$S = -\frac{\Delta P}{P}/\frac{\Delta O}{O} \quad (۱۰)$$

که در آن ΔP اختلاف داده‌ی خروجی مدل (قبل و بعـد از تغییر ضریب هدف)، P متوسط مقادیر خروجی مدل (قبـل و بعد از تغییر ضریب، ΔO اختلاف مقادیر ورودی به مدل و O متوسط مقادییر ورودی بـه مـدل اسـت (Liu et al., 2007).

نتایج و بحث

منحنی‌های رخنه اندازه‌گیـری و شـبیه‌سـازی در شـکل ۱ آمده است. همچنین، بیشینه غلظت خروجی از محیط‌های ریز، متوسط و درشت‌دانه به‌ترتیب در حجم حفره‌ای برابـر بـا ۱/۲، ۱/۴ و ۱/۷۵ به‌مقـدار ۰/۵، ۰/۲۶ و ۰/۲۹ بـود. مقایسه شـکل‌های a، b و c در شـکل ۱ نشـان داد شـیب بخش بالارونده منحنی محیط ریزدانه تنـدتر از دو محـیط دیگر بود که نشان‌دهنده یکنواختی بیشـتر انـدازه حفـرات در محیط ریزدانه بود. کمتر بودن مقادیر انتشـارپذیری در محیط ریزدانه (جدول ۱) نیـز موید همـین نتیجـه اسـت (Bagheri et al., 2019). وقـوع دیرتـر بیشـینه غلظـت در

محیط‌های درشت‌دانه متأثر از فاصله‌گرفتن زبانه پیشروی سریع آلودگی در حفرات درشت در مقایسه با زبانه‌های عقب‌افتاده در مجاری باریک بوده که سبب رقیق‌شدن جبهه پیشروی آلودگی به کمک جریانات جانبی و موازی است. زمان اتمام منحنی رخنه در محیط‌های ریز، متوسط و درشت‌دانه به ترتیب در حجم حفره‌ای ۱/۸، ۳/۳ و ۳ مشاهده شد که در مقایسه با نقطه اوج منحنی‌ها مصرف ۰/۶، ۱/۹ و ۱/۲۵ حجم آب حفره‌ای جهت اتمام دنباله آلودگی را آشکار می‌کند. این نتایج دنباله کشیده منحنی و تأخیر در پاک‌سازی محیط متوسط‌دانه را نشان داد که نمایان‌کننده نقش وجود تعداد زیادی از مجاری باریک در مقایسه با حفرات درشت در این محیط بود. نتایج مربوط به میزان دقت منحنی‌های شبیه‌سازی در جدول ۲ آمده است. مطابق آن، مقادیر آماری RMSE برای مدل تعادلی، جذب تک مکانی و جذب دو مکانی به ترتیب ۰/۰۱-۰/۰۹، ۰/۰-۰۳/۰۱ و ۰/۰۱ بود که نشان‌دهنده دقت بالاتر مدل جذب دومکانی است. نمایه آماری R^2 نیز نتایج مشابهی را نشان داد، به‌طوری که مقادیر آماری R^2 برای این سه مدل در خاک ریزدانه به ترتیب ۰/۵۳۹، ۰/۹۶۶ و ۰/۹۸۶ بود. این نتایج در دیگر خاک‌ها نیز تکرار شد که موید دقت بالاتر مدل جذب دو مکانی نسبت به دو مدل دیگر بود. نتایج مطالعه اوردیالز و همکاران نیز مبین دقت بیشتر مدل دومکانی بود (Urdiales et al; 2025).



شکل ۱. منحنی‌های شبیه‌سازی شده با مدل تعادلی، تک‌مکانی و دومکانی در خاک‌های ریزدانه (a)، متوسط‌دانه (b) و درشت‌دانه (c).

Fig 1. Simulated Curves by Models: Equilibrium, Single-location, and Two-location in Fine-grained (a), Medium-grained (b), and Coarse-grained (c) Soils.

مقایسه منحنی‌های شبیه‌سازی نشان‌دهنده ضعف و بیش‌برآوردی مدل تعادلی در تمام نقاط رخنه محیط‌های ریزدانه و درشت‌دانه (شکل‌های a و c) و دقت نسبتاً پایین در نقطه اوج و بخشی از دنباله منحنی بستر متوسط‌دانه است (شکل b). بررسی نتایج آماره جرم باقیمانده (CRM) نیز همین نتایج را تکرار کرد. از آن‌جایی‌که بهترین مقادیر برای این آماره، صفر می‌باشد و مقادیر مثبت و منفی ضریب جرم باقیمانده به ترتیب تمایل مدل به کم‌برآوردی و بیش‌برآوردی را نشان می‌دهد طبق جدول ۲ مقدار این ضریب برای هر سه محیط متخلخل در مدل جذب دو مکانی صفر یا نزدیک به صفر بود؛ اما برای مدل تعادلی بیش‌برآوردی شبیه‌سازی را نشان داد. مقادیر این ضریب برای مدل جذب تک مکانی در دو محیط ریزدانه و متوسط دانه نزدیک به صفر بود؛ اما در محیط درشت‌دانه همانند مدل تعادلی بیش‌برآودی را نشان داد. هر چند مدل جذب تک‌مکانی در محیط‌های ریزدانه و متوسط دانه دقت بسیار مشابهی با مدل جذب دو مکانی داشت و روند تغییرات منحنی را به درستی شبیه‌سازی نمود؛ اما مدل جذب دومکانی 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 فرایند جذب و رهاسازی املاح در این محیط‌ها از نوع تعادلی و جنبشی به‌صورت توأمان است. از این رو، به‌کارگیری مکانیسم‌های چندگانه جذب در شبیه‌سازی انتقال املاح به‌منظور ارتقا دقت و درک صحیح از نوع و شدت فرایندهای مؤثر در انتقال املاح توصیه می‌شود (Simunek and van Genuchten, 2008; Simunek et al., 2018).

با توجه به نتایج دقت مدل‌ها، تحلیل ضرایب به دست آمده از مدل جذب دو مکانی جهت درک بهتر فرایندهای مؤثر در جابه‌جایی املاح نسبت به دو مدل دیگر مهم‌تر و منطقی‌تر است. مقادیر کسر مکان‌های تعادلی (F) در محیط‌های ریز، متوسط و درشت‌دانه به ترتیب ۰/۰۰۰۵، ۰/۰۷ و ۰/۰۹ بود (جدول ۳)؛ لذا، سهم مکان‌های جذب و

واجذبِ تعادلی در این سه محیط به ترتیب ۰/۰۵، ۷ و ۹ ٪ بود که نشان‌دهنده برجسته بودن نقش فرایندهای 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 نیترات و مواد آلی محلول بود. ضرایب توزیع (KD) در سه محیط ریز، متوسط و درشت‌دانه به ترتیب ۲۳/۲، ۲/۴۳ و ۲/۴۱ لیتر بر کیلوگرم بود که نشان می‌دهد محیط ریزدانه به‌دلیل داشتن حفرات ریز غیرفعال و سطح تماس بیشتر با املاح، قدرت جذب بالاتری در نگهداشت املاح نسبت به دو محیط دیگر دارد (Yu et al., 2023).

جدول ۲. مقادیر ضرائب آماری برای ارزیابی دقت مدل‌ها

Table 3. Statistical Coefficient Values For Evaluating The Accuracy of Models

خاک Soil	مدل تعادلی Equilibrium Model			مدل جذب تک مکانی Single-Site Model			مدل جذب دو مکانی Dual-Site Model		
	R^2	CRM	RMSE	R^2	CRM	RMSE	R^2	CRM	RMSE
Fine graine	0.539	-0.65	0.09	0.966	-0.07	0.02	0.986	-0.07	0.01
Medium grain	0.957	-0.10	0.01	0.963	-0.09	0.01	0.974	0.00	0.01
Coarse grain	0.767	-0.29	0.04	0.859	-0.30	0.03	0.976	0.00	0.01

جدول ۳. ضرایب حاصل از شبیه‌سازی منحنی رخنه

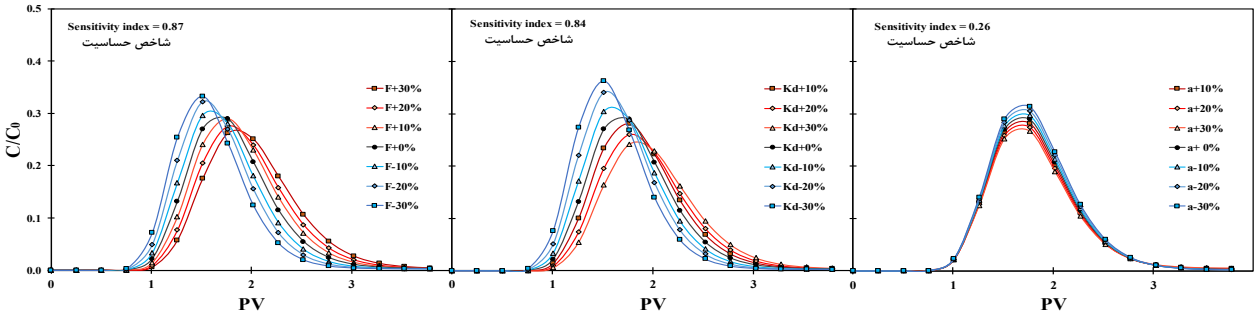
Table 2. Coefficients Obtained from Simulating Breakthrough Curves

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

مقادیر ضریب شدت درجه اول (α) مربوط به مکان‌های جنبشی در محیط ریز، متوسط و درشت دانه برابر ۰/۰۰۰۸، ۰/۰۱۸ و ۰/۰۵۱ بر دقیقه بود که مبین شدت 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 ۱c). باقری و همکاران (Bagheri et al., 2024) گزارش دادند که املاح با غلظت کمتر در محیط متخلخل ضریب α را افزایش می‌دهد. همچنین شاه‌محمدی و تاران (Shahmohammadi and Taran., 2019) با انجام آزمایشی بر روی ستون‌های شنی اشباع، تأثیر غلظت ورودی بر ضرایب مدل دومکانی را اثبات کردند و گزارش دادند در غلظت‌های پایین، قسمت قابل‌توجهی از املاح در مکان‌های جذب کند قرار می‌گیرد. با توجه به برتری مدل جذب دومکانی نسبت به دو مدل دیگر، آنالیز حساسیت بر روی سه پارامتر کلیدی مدل جذب دو مکانی انجام شد و نتایج آن در شکل ۲ آمده است.

بررسی نتایج نشان داد ضرایب F و KD به ترتیب با مقادیر شاخص حساسیت ۰/۸۷ و ۰/۸۴ دارای بیشترین حساسیت در شبیه‌سازی منحنی رخنه‌ی شوری بودند، به‌طوری‌که با افزایش مقدار F پیک منحنی به سمت تأخیر زمانی حرکت کرده و پهن‌تر شد که نشان از افزایش سهم مکان‌های جذب کند دارد. در مقابل، کاهش مقدار F باعث انتقال منحنی به سمت جلو و کاهش تأخیر در رسیدن شوری به خروجی ستون شد. این نتایج بیانگر آن است که تغییرات در مقدار F باعث تغییرات بارز در سرعت و میزان پیشروی ماده در محیط متخلخل است. همچنین، با افزایش KD، منحنی رخنه به سمت تأخیر زمانی بیشتر و پهن‌شدگی حرکت کرد که مؤید افزایش جذب املاح در محیط متخلخل است. برعکس، کاهش مقدار KD باعث پیش‌رس‌تر شدن بیشینه منحنی شد. این موضوع

نشان‌دهنده نقش مهم ضریب توزیع در کنترل فرآیند جذب و حرکت ماده در محیط متخلخل است. مقدار شاخص حساسیت برای ضریب α برابر با ۰/۲۶ بود که مبین حساسیت کم مدل به تغییرات این ضریب بود. تغییرات در این پارامتر باعث جابه‌جایی جزئی در منحنی‌ها شد و در کل شکل و موقعیت بیشینه‌ی منحنی تقریباً ثابت باقی ماند. این موضوع بیانگر آن است که فرآیند انتقال بین مکان‌های جذب سریع و کند، نقش کمتری در مقایسه با میزان جذب و نسبت مکان‌های جذب ایفا می‌کند.



شکل ۲. آنالیز حساسیت پارامترهای مدل.

Fig 2. Sensitivity Analysis of Model Parameters.

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، بیشینه منحنی رخنه در حجم منفذی بالاتری اتفاق افتاد که متأثر از فاصله گرفتن زبانه پیشروی سریع آلودگی در حفرات درشت در مقایسه با زبانه‌های عقب‌افتاده 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 است.

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 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.cej.2009.10.020

Simunek, J., & van Genuchten, M. T. (2008). Modeling nonequilibrium flow and transport processes using HYDRUS. *Vadose zone journal*, *7*(2), 782-797.

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., & Sejna, 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

Urdiales, C., Urdiales-Flores, D., Tapia, Y., Cáceres-Jensen, L., Šimůnek, 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

Freeze, R. A., & Cherry, J. A. (1979). Groundwater prentice. *Englewood Cliffs, Englewood Cliffs*.

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

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

Liu, H. F., Génard, M., Guichard, S., & Bertin, N. (2007). Model-assisted analysis of tomato fruit growth in relation to carbon and water fluxes. *Journal of Experimental Botany*, 58(13), 3567-3580.

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: An experimental study. *arXiv preprint arXiv:2111.01288*. https://doi.org/10.48550/arXiv.2111.01288

Shahmohammadi-Kalalagh, S., & 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. https://doi.org/10.1007/s13762-018-2159-z

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