



شاپا چاپی: ۲۲۵۱-۷۴۸۰
شاپا الکترونیکی: ۲۲۵۰-۷۴۰۰

نشریه حفاظت منابع آب و خاک

آدرس تارنما:

<https://wsrj.srbiau.ac.ir>

پست الکترونیک:

iauwsrcj@srbiau.ac.ir

iauwsrcj@gmail.com

سال یازدهم

شماره سه

بهار ۱۴۰۱

تاریخ دریافت:

۱۴۰۰/۰۶/۲۲

تاریخ پذیرش:

۱۴۰۰/۰۸/۳۰

صفحات: ۷۷-۸۸



بررسی انتقال تعادلی و غیر تعادلی بروماید در خاک‌های جنگلی و مرتعی در مقیاس آزمایشگاهی

نیما گلابی‌زاده^۱، محمدرضا دلایان^۲، شهرام شاه‌محمدی کاللق^{۳*}، مریم حاج رسولی^۴ و سیامک ساعدی^۵

۱) دانشجوی دکتری، گروه علوم و مهندسی خاک، واحد تبریز، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران.

۲) استادیار، گروه علوم و مهندسی خاک، واحد تبریز، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران.

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

۴) استادیار، گروه علوم و مهندسی خاک، واحد تبریز، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران.

۵) استادیار، گروه علوم و مهندسی خاک، واحد تبریز، دانشگاه آزاد اسلامی، تبریز، ایران.

* نویسنده مسئول مکاتبات: shahmohammadi_sh@iaut.ac.ir

چکیده:

زمینه و هدف: لازمه مطالعه و مدیریت بهتر انتقال املاح در محیط‌های متخلخل، شناخت رفتار انتقال آن‌ها با استفاده از مدل‌های مناسب می‌باشد. در این تحقیق، مدل‌های انتقال توده‌ای-پخش (CDE) و روان-راکد (MIM) به ترتیب به‌عنوان مدل‌های فیزیکی تعادلی و غیرتعادلی برای شبیه‌سازی انتقال بروماید در ستون‌های خاک جنگلی با بافت لوم‌رسی و خاک مرتعی با بافت لوم شنی (به طول ۱۰ و قطر ۶ سانتی‌متر) در دو حالت اشباع و غیراشباع بکار گرفته شدند.

روش پژوهش: ستون‌های تهیه شده از خاک هوا خشک شده به قطر ۶ و ارتفاع ۱۰ سانتی‌متر جهت آزمایش‌های رخنه بروماید به کار گرفته شد. آزمایش رخنه بروماید در دو حالت نزدیک اشباع (تحت بار آبی ۱- سانتی‌متر) و اشباع (تحت بار آبی ۳ سانتی‌متر) انجام شد. اشباع نمودن ستون‌ها از قسمت پایین با محلول زمینه ۰/۰۱ مولار $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ انجام شد. در حالت نزدیک اشباع، محلول ردياب CaBr_2 با غلظت ۰/۰۱ مولار (Co) برابر با یک حجم منفذی به‌صورت پالسی از طریق دیسک نفوذ وارد ستون‌های اشباع شده از محلول زمینه گردید. در حالت اشباع نیز از یک ظرف ماریوت برای برقراری بار ثابت آبی سه سانتی‌متری استفاده شد. با شروع ورود پالس به ستون‌های خاک، نمونه‌های محلول خروجی به حجم ۰/۱ حجم منفذی به همراه درج زمان جهت تعیین غلظت بروماید در ظروف پلاستیکی جمع‌آوری شد. پس از ورود کامل پالس ردياب (CaBr_2) دوباره جریان اشباع ماندگار محلول زمینه $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ در ستون‌ها برقرار و غلظت بروماید با استفاده از یک دستگاه pH متر مجهز به الکتروود انتخاب‌گر بروماید اندازه‌گیری شد. غلظت‌های اندازه‌گیری شده تبدیل به غلظت نسبی (C/Co) گردید و منحنی‌های رخنه از ترسیم C/Co در مقابل زمان (t) و یا حجم منفذی به‌دست آمد.

یافته‌ها: پارامترهای ضریب تبادل جرمی (w) و کسر جزء روان (β) به‌عنوان شاخص تشخیص انتقال تعادلی و غیرتعادلی، به ترتیب با داشتن مقادیر کوچک‌تر از ۱۰۰ و کوچک‌تر از ۱ در هر دو نوع خاک مورد مطالعه نشان دادند انتقال بروماید به‌صورت انتقال نامتعارف یا انتقال غیرفیزیکی و غیرتعادلی بوده و مدل روان-راکد، نسبت به مدل انتقال توده‌ای-پخش که بر اساس قانون انتشار فیزیکی و فرض انتقال تعادلی املاح بنا شده است کارآمدتر بوده و برای شبیه‌سازی بروماید در ستون‌های خاک لوم‌رسی و لوم شنی توصیه می‌گردد. برازش و مقایسه منحنی‌های رخنه و مقادیر شاخص‌های آماری ضریب تبیین (R^2) و جذر میانگین مربعات خطا (RMSE) نیز کارایی مدل غیرتعادلی MIM را در شبیه‌سازی انتقال بروماید در خاک‌های جنگلی و مرتعی تأیید کرد.

نتایج: برازش بهتر منحنی‌های رخنه اندازه‌گیری شده و برآورد شده بروماید با مدل غیرتعادلی بخصوص در قسمت دم یا انتهایی منحنی-های رخنه بیانگر دقت و کارایی بیشتر مدل غیرتعادلی می‌باشد. با توجه به اینکه نمونه‌ها به‌صورت دست‌خورده در ستون‌ها جایگزین گشتند لذا می‌توان گفت شرایط ناهمگنی در ستون‌های مورد آزمایش برقرار بوده است و بر اساس گزارش Huang و همکاران (۲۰۰۵) و Berkowitz و همکاران (۲۰۰۸) ناهمگنی، می‌تواند یکی از دلایل توجیه‌کننده کارایی بهتر مدل‌های غیرتعادلی در تحقیق حاضر باشد. کارایی بهتر مدل غیرتعادلی روان-راکد نسبت به مدل تعادلی انتقال-پخش در این تحقیق آزمایشگاهی محدود و کنترل شده نمی‌تواند قضاوت محکم و مطمئنی در ارزیابی این مدل‌ها باشد قضاوت دقیق‌تر، در گرو انجام تحقیقات و آزمایش‌ها در شرایط واقعی و مزرعه‌ای و با لحاظ کردن بیشتر پارامترهای مؤثر و دخیل اشاره شده خواهد بود.

کلیدواژه‌ها: انتقال فیزیکی، انتقال نامتعارف، مدل انتقال توده‌ای-پخش (CDE)، مدل روان-راکد (MIM)، منحنی رخنه

همچنین جذب به صورت خطی و برگشت‌پذیر باشد (Pang et al., 2002). این در حالی است که شرایط طبیعی یک آبخوان وضعیتی متفاوت از حالت تعادلی دارد که به آن وضعیت غیرتعادلی گویند. در حالت غیرتعادلی انتقال آلاینده‌ها و املاح در لایه‌های خاک می‌تواند تابع شرایط فیزیکی لایه‌های خاک (ناشی از ویژگی‌های حالت ناهمگنی آبخوان، جریان ترجیحی و انتشار سینیتیک) و یا شرایط شیمیایی آن‌ها باشد. همچنین تأثیر سرعت آب در محیط متخلخل را نیز نباید نادیده گرفت. اگرچه تحت شرایط تعادلی این مسئله نادیده گرفته می‌شود (Pang et al., 2002).

مدل‌های مختلفی همچون تابع تبدیل لاگ نرمال^۴ (CLT) (Jury, 1982; Jury and Roth, 1990)، حرکت تصادفی با زمان پیوسته^۵ (CTRW) (Berkowitz and Scher, 2008) و رابطه کسری انتقال-پخش^۶ (FADE) (Benson et al., 2000a, b) جهت مدل‌سازی انتقال نامتعارف املاح و آلاینده‌ها پیشنهاد شده است. همچنین از جمله‌ی این مدل‌ها، می‌توان به مدل روان-راکد^۷ (MIM) (Bond and Wierenga, 1990; Pang et al., 2002) که از آن به عنوان مدل فیزیکی غیرتعادلی^۸ یا مدل دو ناحیه‌ای^۹ نیز یاد می‌شود اشاره کرد که می‌تواند به عنوان یک مدل مناسب برای شبیه‌سازی انتقال املاح در انواع محیط‌های متخلخل (همگن و غیرهمگن) مورد استفاده قرار گیرد. در مدل روان-راکد (MIM) برخلاف مدل CDE که فرض می‌شود همه آب موجود در خاک در انتقال املاح نقش ایفا می‌کند فقط تأثیر و دخالت بخشی از آب موجود در خاک در انتقال املاح در نظر گرفته می‌شود. به عبارت دیگر می‌توان آب موجود در خاک را به دو بخش روان، بخشی از آب خاک که در انتقال توده‌ای املاح نقش دارد و راکد، بخش دیگر آب موجود در خاک که غیرمتحرک است و در انتقال توده‌ای املاح نقش ندارد و تنها از طریق

بیان دقیق و درست انتقال آلاینده‌ها در محیط‌های متخلخل، جهت ارزیابی و اصلاح آلاینده در خاک‌ها و آبخوان‌ها بسیار مهم می‌باشد. یک جنبه مهم در درک سرنوشت املاح و آلاینده‌ها عبارت است از مشخص کردن رفتار انتقال آن‌ها با استفاده از مدل‌های مناسب. معادله انتقال توده‌ای-پخش^۱ (CDE) اولین مدلی است که به طور وسیع برای بیان انتقال املاح و آلاینده‌ها در محیط‌های متخلخل مورد استفاده قرار گرفته و نتایج قابل قبول و رضایت‌بخشی در خاک‌های همگن و البته در مقیاس آزمایشگاهی به دست داده است (Jury, 1982; Huang et al., 2005). بررسی‌ها نشان داده که این مدل نمی‌تواند تمام جوانب و رفتار حرکت و انتقال املاح را به ویژه در خاک‌های غیر همگن پیش‌بینی نماید (Huang et al., 2005; Berkowitz et al., 2008). با توجه به اینکه محیط متخلخل طبیعی مثل خاک‌های طبیعی غالباً غیر همگن بوده و سرعت جریان آب با غیرهمگنی محیط به شدت تغییر می‌یابد لذا فرآیند انتقال املاح در این محیط‌ها پیچیده بوده و منحنی‌های رخنه برخلاف خاک‌های همگن که معمولاً شکل متقارن دارند کشیده‌تر خواهند بود که از این پدیده به عنوان انتقال نامتعارف^۲ یا انتقال غیرفیزیکی یاد^۳ می‌شود (Berkowitz and Scher, 1995; Berkowitz et al., 2008). بنابراین انتقال املاح در محیط متخلخل عمدتاً غیرفیزیکی بوده و شبیه‌سازی انتقال آن‌ها با استفاده از مدل انتقال توده‌ای-پخش بر اساس فرضیات اعمال شده در ساختار این مدل، مشکل‌تر می‌گردد و بایستی مدلی با کارایی و دقت بیشتری جایگزین آن گردد. یکی از محدودیت‌های مدل CDE فرض انتقال تعادلی املاح در سیستم خاک می‌باشد درحالی‌که انتقال املاح در محیط متخلخل و منابع آب زیرزمینی در صورتی می‌تواند تعادلی در نظر گرفته شود که زمان کافی برای جذب وجود داشته باشد و انتقال در یک محیط متخلخل همگن انجام شود و

⁴ Convective Lognormal Transfer

⁵ Continuous Time Random Walk model

⁶ Fractional Advection Dispersion Equation

⁷ Mobile-Immobile Model

⁸ Physical non-equilibrium

⁹ Two region model

¹ Convection-Dispersion Equation

² Anomalous transport

³ Convective Lognormal Transfer

۳۸° عرض شمالی، "۵۳/۰۱' ۰۲' ۴۶° طول شرقی و مرتع تبدیل شده به زراعت دیم با موقعیت جغرافیائی "۶۷/۶۳' ۵۱' ۳۸° عرض شمالی، "۵۹/۳۰' ۰۳' ۴۷° طول شرقی و از عمق صفر تا ۲۰ سانتی‌متری در منطقه کلیبر استان آذربایجان شرقی انتخاب شد. برخی ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی دو نوع خاک مورد آزمایش در جدول ۱ آمده است. ستون‌های تهیه شده از خاک هوا خشک شده به قطر ۶ و ارتفاع ۱۰ سانتی‌متر با جرم مخصوص ظاهری (g/cm³) ۱/۴۱ در خاک لوم شنی و (g/cm³) ۱/۳۵ در خاک لومرسی جهت آزمایشات رخنه برومید به کار گرفته شد. Kamra و Lenartz (۲۰۰۵) گزارش نمودند که طول حدود ۱۰ سانتی‌متر ستون خاک آزمایشگاهی می‌تواند شبیه‌سازی قابل قبولی از شرایط مزرعه‌ای باشد. کف ستون‌ها در داخل یک قیف پلاستیکی بر روی اسکاچ و تور سیمی تثبیت گردید. نقش تور سیمی و اسکاچ برای نگهداری و تحمل وزن ستون خاک و جلوگیری از شسته شدن احتمالی ذرات خاک از انتهای ستون خاک بود. منافذ تور سیمی و اسکاچ روی آن به اندازه‌ای درشت بود که محدودیتی برای جریان آب در ستون خاک ایجاد نشود. برای ممانعت از جریان ترجیحی در مجاورت دیواره ستون‌ها، دیواره داخلی ستون‌های خاک قبل از پر نمودن خاک به پارافین مذاب آغشته شد. آزمایش رخنه بروماید در دو حالت نزدیک اشباع (دستگاه دیسک نفوذ بار آبی ۱- سانتی‌متر) و اشباع (بار آبی ۳ سانتی‌متر) انجام شد. اشباع نمودن ستون‌ها از قسمت پایین با محلول زمینه ۰/۰۱ مولار Ca(NO₃)₂ انجام شد. در حالت نزدیک اشباع (بار آبی ۱- سانتی‌متر)، محلول ردیاب CaBr₂ با غلظت ۰/۰۱ مولار (C₀) برابر با یک حجم منفذی به‌صورت پالسی از طریق دیسک نفوذ وارد ستون‌های اشباع شده از محلول زمینه گردید. در حالت اشباع نیز از یک ظرف ماریوت برای برقراری بار ثابت آبی سه سانتی‌متری استفاده شد (شکل ۱). با شروع ورود پالس به ستون‌های خاک، نمونه‌های محلول خروجی به حجم ۰/۱ حجم منفذی به همراه درج زمان جهت تعیین غلظت بروماید در

فرایندهای دیگر مانند فرایند پخشیدگی در انتقال املاح مؤثر است، تقسیم کرد. فرایند غالب در بخش روان، جریان توده‌ای می‌باشد در نتیجه حرکت آب و انتقال املاح در بخش روان سریع است ولی انتقال املاح از بخش روان به بخش ساکن و یا برعکس از طریق پخشیدگی است و در نتیجه بسیار کند است. بنابراین انتقال نامتعرفی املاح از آب راکد یا غیرمتحرک در سیستم خاک ناشی می‌شود (Bond and Wierenga, 1990; Pang et al., 2002).

کارایی مدل‌های فیزیکی تعادلی یا (CDE) و غیرتعادلی یا (MIM) در شبیه‌سازی انتقال املاح در انواع خاک‌های همگن و غیرهمگن (Toride et al., 2003; Gao et al., 2009; Arora et al., 2011; Moradi and Mehdinejadiani, 2018), خاک‌های اشباع و غیراشباع (Safadoust et al., 2012a; Shahmohammadi-Kalalagh and Taran, 2020), خاک‌های متراکم (Toride et al., 2003; Arora et al., 2011; Safadoust et al., 2012a; Morsali et al., 2019; Shahmohammadi-Kalalagh and Taran, 2020) مورد ارزیابی قرار گرفته و تأیید شده است. علی‌رغم مطالعات متعدد انجام گرفته، قابلیت این مدل‌ها در خاک‌های جنگلی و مرتعی در حالت اشباع و غیراشباع بررسی و ارزیابی نگردیده است، لذا هدف اصلی تحقیق حاضر، بررسی و ارزیابی کارایی مدل‌های تعادلی CDE و غیرتعادلی MIM برای شبیه‌سازی انتقال بروماید در مقیاس آزمایشگاهی و در ستون‌های کوتاه خاک اشباع و غیراشباع جنگلی با بافت لومرسی و مرتعی با بافت لوم شنی می‌باشد.

مواد و روش‌ها

تهیه ستون‌های خاک و انجام آزمایش

نمونه‌های خاک شامل کلاس بافت لومرسی (بافت غالب خاک منطقه) و کلاس بافت لوم شنی به‌ترتیب از مناطق جنگلی ارسباران با موقعیت جغرافیائی "۳۶/۵۶' ۴۹'

تئوری مدل

در این تحقیق، مدل‌های انتقال توده‌ای-پخش (CDE) و روان-راکد (MIM) به‌ترتیب به‌عنوان مدل‌های فیزیکی تعادلی و غیرتعادلی برای شبیه‌سازی انتقال بروماید (به‌عنوان آلاینده) در ستون‌های خاک بکار گرفته شدند.

رابطه سهموی انتقال توده‌ای-پخش برای انتقال یک-بعدي عناصر خشي و غير واکنشگر تحت جریان یکنواخت آب به‌صورت زیر بیان می‌شود (Bear, 2013):

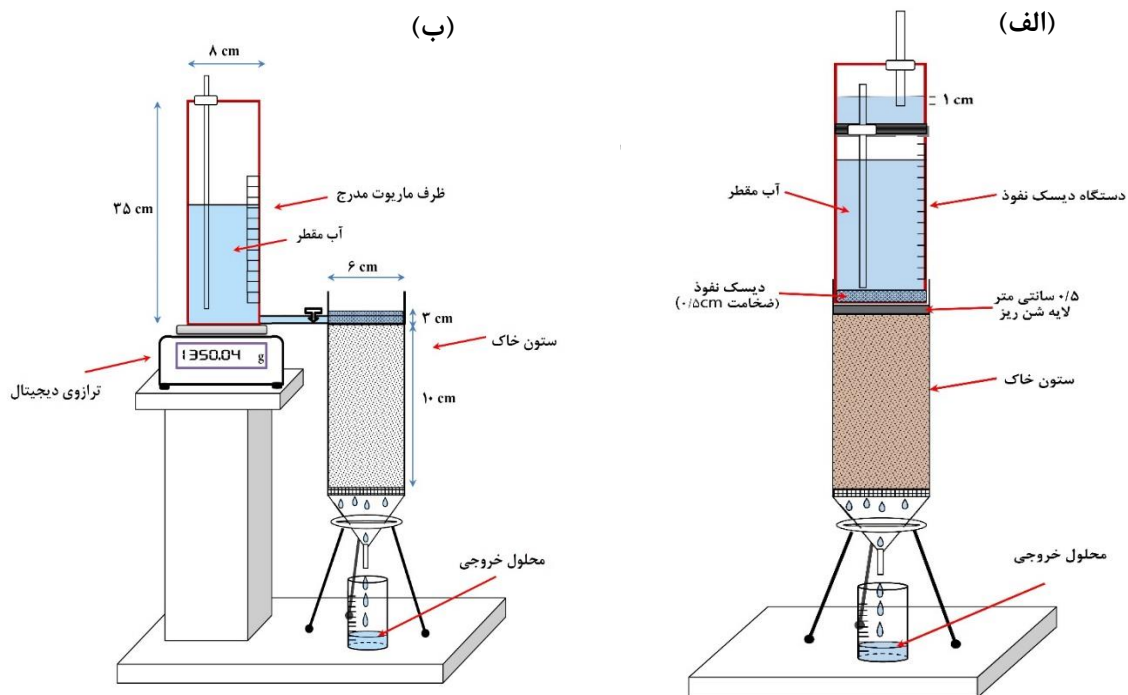
$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - V \frac{\partial C}{\partial x} \quad (1)$$

که C غلظت آلاینده (ML^{-3}), D ضریب پخش هیدرودینامیکی یا (ضریب پخش) ($L^2 T^{-1}$), V سرعت متوسط آب منفذی (L T^{-1}), x فاصله (L) و t زمان (T) می‌باشد.

ظروف پلاستیکی جمع‌آوری شد. پس از ورود کامل پالس ردیاب ($CaBr_2$) دوباره جریان اشباع ماندگار محلول زمینه ($Ca(NO_3)_2$) در ستون‌ها برقرار و غلظت بروماید با استفاده از یک دستگاه pH متر مجهز به الکتروود انتخاب‌گر برومید ساخت شرکت Crison اسپانیا اندازه‌گیری شد. شدت جریان داریسی (q_d) با ثبت و توزین نمونه‌های جریان خروجی، اندازه‌گیری گردید (Jarvis et al., 2008). آزمایش تا جایی ادامه یافت که غلظت بروماید اندازه‌گیری شده در محلول خروجی به صفر برسد. غلظت‌های اندازه‌گیری شده تبدیل به غلظت نسبی (C/C_0) گردید و منحنی‌های رخنه از ترسم C/C_0 در مقابل زمان (t) و یا حجم منفذی به‌دست آمد.

جدول ۱. ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی دو نمونه خاک مورد استفاده در آزمایش

ماده	کربنات	EC (dS/m)	pH (-)	میانگین وزنی قطر خاکدانه‌ها (mm)	تخلخل (-)	جرم مخصوص ظاهری (g/cm ³)	سیلت رس (%)	شن (%)	کلاس	
									نوع خاک	بافت خاک
۳/۸۱	۱۷	۰/۸۲	۷/۵	۰/۵۱	۰/۵۱	۱/۳۵	۳۱	۴۰	۲۹	جنگلی لومرسی
۲/۸۶	۸/۱۰	۰/۵۱	۷/۶	۰/۱۳	۰/۴۵	۱/۴۱	۱۲	۲۸	۶۰	مرعی لوم شنی



شکل ۱. شکل شماتیک دستگاه‌های استفاده شده در انجام آزمایش‌ها: الف) دیسک نفوذ و ب) ظرف ماریوت

تخمین و برآورد پارامترهای انتقال

در این تحقیق، جهت تخمین و برآورد پارامترها از روش مدل‌سازی معکوس که یک روش بهینه‌سازی است استفاده گردید. در روش مدل‌سازی معکوس علاوه بر داده‌های اندازه‌گیری شده به یک مدل ریاضی مناسب که بیان‌کننده روابط حاکم بر پدیده باشد و یک الگوریتم بهینه‌سازی برای کمینه کردن یک تابع هدف نیاز است. با توجه به قابلیت مدل‌سازی معکوس نرم‌افزار CXTFIT2.1 که بر اساس حل تحلیلی مدل تعادلی انتقال توده‌ای-پخش (CDE) و مدل غیرتعادلی روان-راکد (MIM) بسط و توسعه یافته و به الگوریتم بهینه‌سازی لونیبرگ-مارکوارتد مجهز است به ترتیب جهت برآورد پارامترهای مدل انتقال توده‌ای-پخش (پارامترهای V و D) و مدل روان-راکد (پارامترهای V_m ، D_m ، $\beta = (\theta_m/\theta)$ و ω)، از نرم‌افزار مذکور استفاده شد. تابع هدف نیز برای مدل‌های CDE و MIM به ترتیب به صورت روابط (۳) و (۴) می‌باشد:

$$\chi^2(V, D) = \sum_{i=1}^n [C_i - C(x, t_i; V, D)]^2 \quad (3)$$

$$\chi^2(V_m, D_m, \beta, \omega) = \sum_{i=1}^n [C_i - C(x, t_i; V_m, D_m, \beta, \omega)]^2 \quad (4)$$

در روابط فوق، C_i غلظت مشاهده‌ای، $C(x, t_i; V, D)$ و $C(x, t_i; V_m, D_m, \beta, \omega)$ به ترتیب مقدار غلظت برآورد شده در موقعیت x و زمان t در مدل‌های CDE و MIM و n تعداد کل مشاهدات می‌باشد.

به منظور بررسی و ارزیابی دقت مدل‌ها، از شاخص‌های آماری ضریب تبیین (R^2) و جذر میانگین مربعات خطا (RMSE) مطابق روابط زیر استفاده گردید:

(۵)

$$R^2 = \frac{\left(\sum_{i=1}^n (P_i - \bar{P}_i)(O_i - \bar{O}_i) \right)^2}{\sum_{i=1}^n (P_i - \bar{P}_i)^2 \sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O}_i)^2} \quad (6)$$

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

مدل غیرتعادلی روان - راکد، رطوبت خاک را به دو بخش روان و راکد تقسیم می‌نماید و به مدل دو ناحیه‌ای نیز معروف است. رطوبت روان شامل رطوبتی است که در منافذ بین خاکدانه‌ای (درشت) جای گرفته است و وضعیت پویا دارد و انتقال املاح به وسیله جریان توده‌ای ۱ و پخشیدگی هیدرودینامیکی ۲ در آن‌ها صورت می‌گیرد. رطوبت راکد رطوبتی است که در منافذ درون خاکدانه‌ای (ریز) واقع است و ساکن فرض می‌شود و حرکت املاح تنها به وسیله انتشار مولکولی ۳ است. به عبارت دیگر، مدل راکد-روان شامل رابطه انتقال توده‌ای-پخش جهت بیان انتقال املاح در ناحیه روان و نیز رابطه‌ای که بیانگر انتقال املاح بین نواحی روان (متحرک) و راکد (غیر متحرک) است می‌باشد که رابطه دوم میزان انتقال املاح را متناسب با اختلاف غلظت بین دو ناحیه مذکور بیان می‌کند. رابطه یک بعدی مدل روان-راکد (MIM) برای انتقال عناصر خشی و غیر واکنشگر تحت جریان یکنواخت آب به صورت زیر بیان می‌شود (Gao et al., 2009):

$$\theta_m \frac{\partial C_m}{\partial t} + \theta_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \theta_m D_m \frac{\partial^2 C_m}{\partial x^2} - \theta_m V_m \frac{\partial C_m}{\partial x} \quad (2 \text{ الف})$$

$$\theta_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \omega (C_m - C_{im}) \quad (2 \text{ ب})$$

در روابط فوق، θ_m و θ_{im} به ترتیب رطوبت حجمی در ناحیه‌ی روان و راکد هستند و $\theta_m + \theta_{im} = \theta$ که θ حجم رطوبت کل محیط بوده و برای محیط اشباع با تخلخل برابر می‌باشد (-). C_m و C_{im} به ترتیب غلظت املاح در ناحیه‌ی روان و راکد ($M L^{-3}$)، D_m ضریب پخش هیدرودینامیکی ناحیه روان ($L^2 T^{-1}$)، V_m سرعت آب منفذی ناحیه روان ($L T^{-1}$)، $V_m \theta_m$ شدت جریان در ناحیه‌ی روان یا همان سرعت اندازه‌گیری شده داریسی ($L T^{-1}$) و ω ضریب تبادل جرمی املاح بین دو ناحیه روان و ساکن (T^{-1}) که به محیط متخلخل و نوع ماده و ضریب انتشار مولکولی بستگی دارد.

¹ Convection

² Hydrodynamic dispersion

³ Molecular diffusion

(نقطه اوج) بروماید در منحنی رخنه نسبت به حالت غیراشباع می‌باشد. روند تغییرات ضریب انتشار پذیری در هر دو مدل تعادلی (λ_{CDE}) و غیرتعادلی (λ_{MIM}) تقریباً مشابه می‌باشد.

عدد پکلت ($Pe=vL/D$) به صورت نسبت فرآیند انتقال توده‌ای به فرآیند پخش هیدرودینامیکی تعریف می‌شود (جدول ۲). این عدد یکی از عوامل مؤثر بر منحنی رخنه است. عدد پکلت نامتقارنی و چولگی یا کشیدگی منحنی رخنه را نشان می‌دهد. مقدار کم آن، بیانگر پخشیدگی بیشتر و در نتیجه نامتقارنی بیشتر می‌باشد. برای مقادیر بزرگ‌تر، منحنی رخنه به حالت تقارن و به شکل سیگموئیدی (حلقوی) درمی‌آید (Hillel, 2013; Shahmohammadi-Kalalagh and Taran, 2019). با توجه به رابطه عکس بین عدد پیکلت و ضریب انتشارپذیری ($Pe=L/\lambda$)، به ازای طول ثابت و مشخص ستون خاک (L)، تغییرات عدد پیکلت برای خاک‌های مورد مطالعه در دو حالت اشباع و غیراشباع مشابه ضریب انتشارپذیری قابل تفسیر خواهد بود. کاهش مقادیر عدد پیکلت و کشیدگی منحنی‌های رخنه در خاک‌های غیراشباع نسبت به خاک‌های اشباع (شکل ۲) صحت این موضوع را در تحقیق حاضر نشان داد. به عبارتی با افزایش رطوبت، با توجه به افزایش سهم انتقال توده‌ای، میزان جایگزینی کمتر گشته و فرآیند غالب در جابجایی و حرکت بروماید در طول ستون از فرآیند انتقال توده‌ای در خاک اشباع به سمت غالب بودن فرآیند پخش هیدرودینامیکی در خاک‌های غیراشباع شده است. نتیجه مشابه در تحقیق Perfect و همکاران (۲۰۰۲)، Shahmohammadi-Kalalagh و Taran (۲۰۲۰)، و همکاران (۲۰۲۱) و Zhen و همکاران (۲۰۱۶) گزارش شده است. مشابه پارامتر ضریب انتشارپذیری، روند تغییرات عدد پیکلت در هر دو مدل برای خاک‌های مورد مطالعه مشابه می‌باشد.

پارامتر ω (جدول ۲) بیانگر میزان تبادل جرمی املاح (در این مطالعه Br^-) بین دو ناحیه روان و راکد در مدل

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

نتایج و بحث

پارامترهای انتقال بروماید با مدل‌های CDE و MIM

پارامترهای برآورد شده از شبیه‌سازی انتقال بروماید در ستون‌های خاک لوم‌رسی و لوم‌شنی در حالت‌های اشباع و غیراشباع با مدل‌های تعادلی انتقال-پخش (CDE) و غیرتعادلی روان-راکد (MIM) در جدول ۲ آمده است. ضریب انتشار پذیری ($\lambda=D/V$) یک پارامتر تجربی بوده و به عوامل مختلفی از جمله بافت، مقدار ناهمگنی خاک، شدت جریان آب در خاک، مقدار رطوبت، مقیاس آزمایش و ... بستگی دارد (عباسی، ۱۳۸۶). مقدار λ در خاک‌های درشت بافت، همگن و اشباع به ترتیب کمتر از خاک‌های ریزبافت، ناهمگن و غیراشباع است (Perfect et al., 2002; Shahmohammadi-Kalalagh and Taran, 2021). نتایج مشابه در پژوهش حاضر نیز حاصل گردیده است (جدول ۲). در خاک ریزبافت به واسطه افزایش سطح ویژه و افزایش تعداد خلل و فرج نسبت به خاک درشت بافت، پدیده پخش هیدرودینامیکی پدیده غالب می‌باشد (D افزایش می‌یابد) در نتیجه ضریب انتشارپذیری زیادتر می‌گردد. از طرفی افزایش رطوبت باعث افزایش سرعت جریان (V) و یا غالب شدن پدیده انتقال توده‌ای نسبت به پدیده پخش هیدرودینامیکی (D کاهش می‌یابد) و در نتیجه پارامتر λ کاهش می‌یابد. از طرفی بر اساس نظر Jury و Horton (۲۰۰۴) و Asghari و همکاران (۲۰۱۱)، هرچه پالس نمک در شکل منحنی رخنه کمتر پخش شود و ارتفاع آن افزایش یابد بیانگر کوچک‌تر شدن ضریب پخش هیدرودینامیکی (D) در یک سرعت ثابت و در نتیجه کاهش λ می‌باشد. لذا یکی از دلایل احتمالی کوچک بودن λ در خاک اشباع بالا بودن ارتفاع پالس

باشد، بنابراین انتظار می‌رود مدل MIM که بر اساس فرض انتقال غیرتعادلی املاح بسط داده شده است نسبت به مدل CDE (با فرض انتقال تعادلی املاح) کارایی بهتر و بالاتری داشته باشد که شکل ۲ و مقادیر شاخص‌های آماری R^2 و RMSE جدول ۲ مؤید این موضوع هستند. در جدول (۲)، پارامترهای λ ، Pe ، β و ω به ترتیب بیانگر ضریب انتشارپذیری، عدد پیکلت، کسر روان رطوبت و ضریب تبادل جرمی املاح می‌باشند.

منحنی‌های رخنه شبیه‌سازی شده با مدل‌های CDE و MIM

منحنی‌های رخنه اندازه‌گیری شده بروماید در ستون-های اشباع و غیراشباع خاک لوم‌رسی و لوم شنی در شکل ۲ نشان داده شده است. منحنی‌های هر دو خاک، حاصل میانگین سه تکرار است. چنانچه در شکل مذکور مشخص است در خاک‌های لوم شنی اشباع و غیراشباع، منحنی رخنه بروماید به ترتیب در حجم‌های منفذی ۰/۲ و ۰/۴ و در خاک‌های لوم‌رسی اشباع و غیراشباع به ترتیب در حجم‌های منفذی ۰/۳ و ۰/۵ به اوج رسیدند. رسیدن نقطه اوج منحنی رخنه در حجم منفذی بیشتر، نشان دهنده انتقال آهسته‌تر املاح در خاک است. در خاک لوم‌رسی، به علت چسبیدن ذرات خاک به یکدیگر و تعداد بسیار کم منافذ درشت، حرکت آب بسیار کند بود و جریان ترجیحی صورت نگرفت. Ersahin و همکاران (۲۰۰۲) بیان کردند بهم‌خوردگی ساختمان خاک و افزایش سطح تماس ذرات خاک با بروماید در خاک

غیرتعادلی MIM می‌باشد. بر اساس فرض مدل MIM، تبادل املاح بین دو ناحیه روان و راکد تنها در اثر فرآیند انتشار مولکولی صورت می‌گیرد و شدت این تبادل به سطح تماس دو ناحیه، شدت جریان، حجم و ویژگی‌های هندسی منافذ ناحیه راکد بستگی دارد (عباسی، ۱۳۸۶). کاهش میانگین سرعت آب و املاح در منافذ بین خاکدانه-ای باعث می‌شود که تبادل املاح بین دو ناحیه روان (منافذ بین خاکدانه‌ای یا درشت) و راکد (منافذ درون خاکدانه‌ای یا ریز) به علت طولانی‌تر شدن زمان اقامت و ماندگاری بروماید در خاک به مقدار بیشتری انجام بگیرد در نتیجه مقدار ω افزایش می‌یابد (Ersahin et al., 2002). مقادیر پارامتر ω جدول ۲، مبین این موضوع است. در خاک لوم‌رسی به دلیل توسعه قوی ساختمان (با میانگین وزنی قطر خاکدانه‌ها ۰/۵۱ mm) نسبت به خاک لوم شنی با میانگین وزنی قطر خاکدانه‌ها ۰/۱۳ mm، اندازه بزرگ خاکدانه‌ها به معنای افزایش طول مسیر انتشار مولکولی بروماید بوده و باعث کشیدگی نسبی منحنی رخنه شده است (شکل ۲).

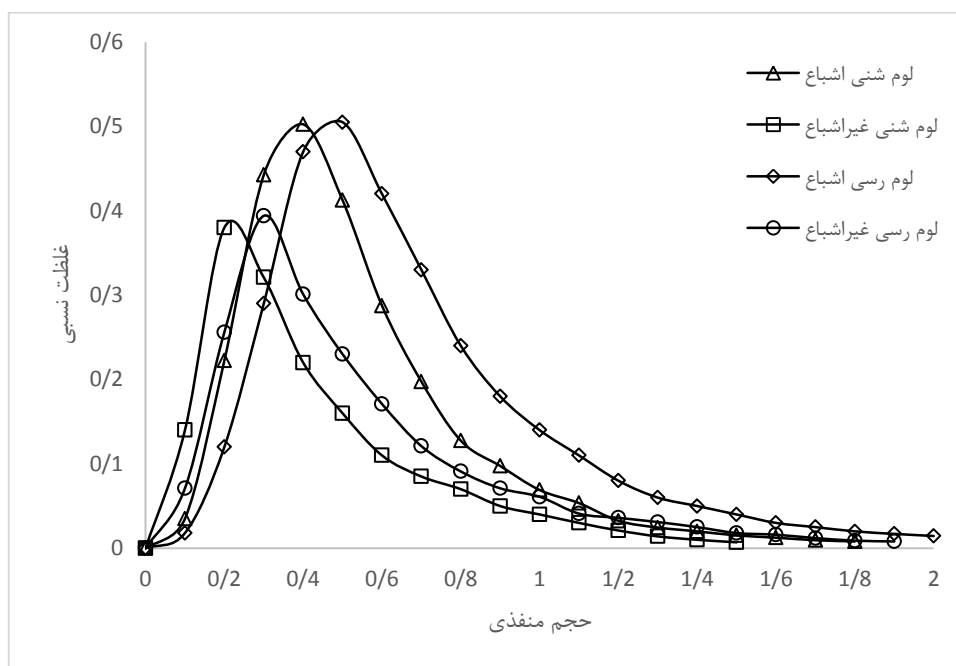
پارامترهای ω و β می‌توانند به‌عنوان شاخصی جهت تشخیص انتقال تعادلی و غیرتعادلی باشند به‌طوری‌که مقادیر $\omega \geq 100$ و $\beta = 1$ بیانگر وجود حالت تعادلی انتقال و مقادیر $\omega < 100$ و $\beta < 1$ مبین انتقال غیرتعادلی در محیط متخلخل می‌باشند (Pang et al., 1999). مقادیر پارامترهای ω و β در این مطالعه (جدول ۲) نشان دهنده انتقال غیرتعادلی فیزیکی بروماید در ستون‌های خاک لوم‌رسی و لوم شنی در حالت‌های اشباع و غیراشباع می-

جدول ۲. پارامترهای برآورد شده انتقال بروماید در ستون‌های خاک لوم‌رسی و لوم‌شنی از مدل‌های تعادلی و غیرتعادلی

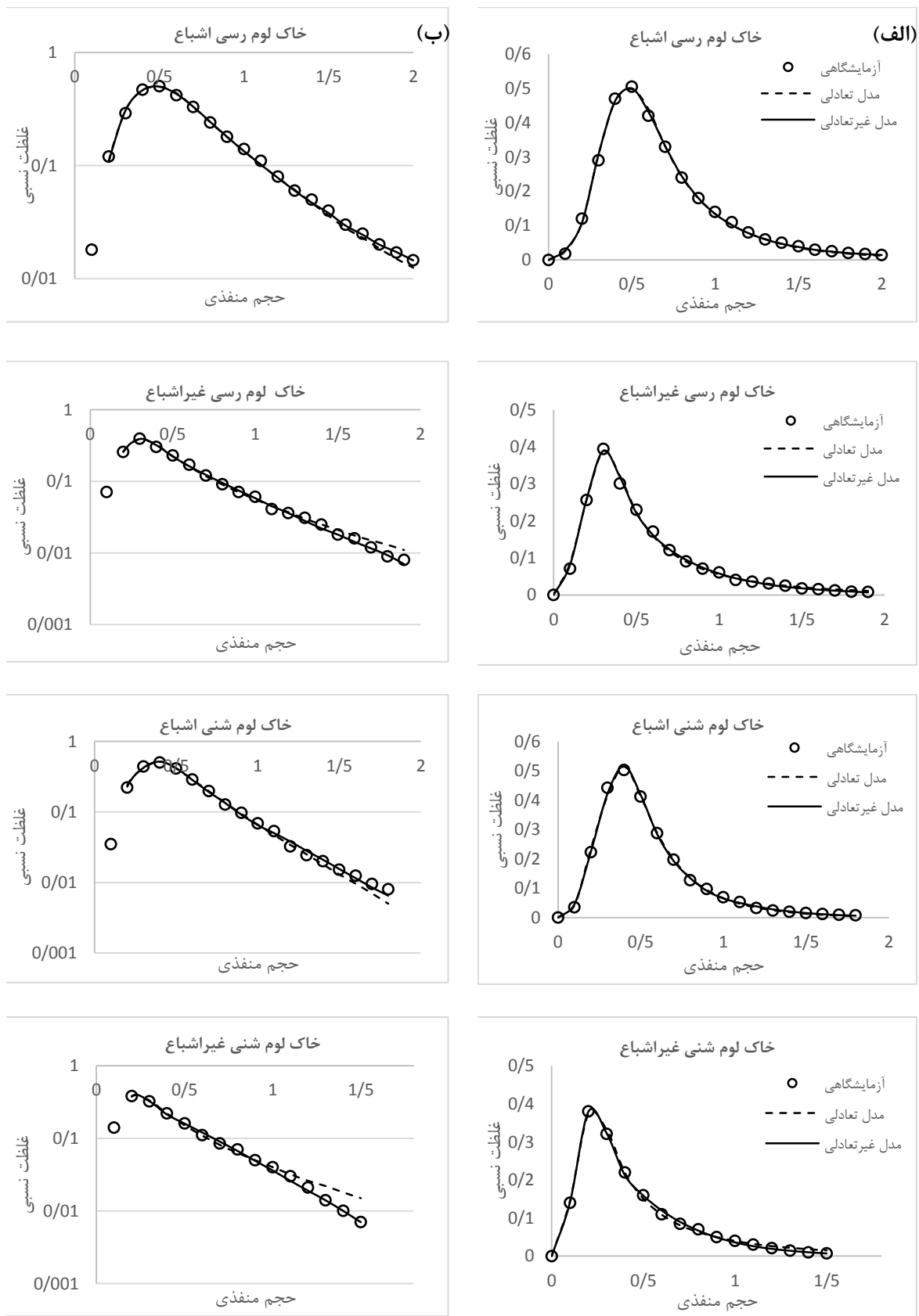
کلاس بافت خاک	وضعیت رطوبتی	مدل تعادلی (CDE)				مدل غیرتعادلی (MIM)					
		R^2	RMSE	Pe (-)	λ (cm)	R^2	RMSE	ω (1/min)	β (-)	Pe_m (-)	λ_m (cm)
لوم‌رسی	اشباع	۰/۹۷۳۷	۰/۰۰۷۴	۱۶/۶۷	۰/۶۰	۰/۹۷۳۸	۰/۰۰۰۹	۱/۴۰	۰/۴۰۲	۲۲/۷۳	۰/۴۴
	غیراشباع	۰/۹۹۴۹	۰/۰۰۰۷۱	۸/۴۷	۱/۱۸	۰/۹۹۵۶	۰/۰۰۰۰۷	۶/۹۴	۰/۵۶۰	۱۷/۲۴	۰/۵۸
لوم شنی	اشباع	۰/۹۹۷۴	۰/۰۰۰۰۸	۲۸/۵۷	۰/۳۵	۰/۹۹۸۰	۰/۰۰۰۰۰۷	۱/۱۳	۰/۶۵۰	۷۱/۴۳	۰/۱۴
	غیراشباع	۰/۹۹۷۲	۰/۰۰۰۰۰۴	۱۳/۳۳	۰/۷۵	۰/۹۹۸۶	۰/۰۰۰۰۰۳	۴/۳۷	۰/۸۷۶	۲۷/۷۸	۰/۳۶

معمولی و نیمه لگاریتمی در شکل ۳ نشان داده شده است. مطابق شکل ۳، بخصوص در حالت نیمه لگاریتمی مشخص است غلظت‌های برآوردی مدل تعادلی در قسمت انتهایی یا اصطلاحاً دم منحنی با غلظت‌های اندازه‌گیری شده و مشاهده‌ای انحراف پیدا کرده‌اند نتایج مشابهی توسط Berkowita و Scher (۱۹۹۷) و Berkowitz و همکاران (۲۰۰۸) نیز گزارش شده است که از این پدیده به‌عنوان انتقال نامتعارف یا انتقال غیرفیزیکی یاد کرده‌اند. مدل غیرتعادلی روان-راکد (MIM)، در مقایسه با مدل تعادلی انتقال توده‌ای-پخش (CDE)، برازش بهتری با داده‌های مشاهداتی و اندازه‌گیری شده در دو نوع خاک را نشان می‌دهد. این رفتار بیانگر این است که انتقال بروماید در ستون‌های خاک لوم‌رسی و شنی بیشتر به‌صورت رفتار نامتعارف یا غیرفیزیکی بوده و مدل غیرتعادلی بجای مدل تعادلی که بر اساس قانون انتشار فیزیکی بنا شده است، برای شبیه‌سازی بروماید مناسب‌تر می‌باشد که نتایج تحلیل آماری در جدول ۲ نیز این موضوع را تأیید می‌کنند.

لوم رسی، باعث کندتر شدن حرکت بروماید در این خاک نسبت به خاک لوم شنی می‌گردد. به‌طور مشابه، شروع سریعتر منحنی رخنه یا ظهور زودتر اصلاح در انتهای خروجی ستون و نقطه اوج منحنی رخنه در خاک لوم شنی نسبت به خاک لوم‌رسی به‌مراتب در حجم منفذی یا مدت زمان کمتری اتفاق افتاده است که می‌تواند به دلیل منافذ درشت خاک، اعوجاج کمتر منافذ و در نتیجه افزایش سرعت جریان باشد (Asghari et al., 2011; Shahmohammadi-Kalalagh and Beyrami, 2015; Safadoust et al., 2016). همان‌طوری‌که بیشتر نیز اشاره گردید این وضعیت، نشان دهنده پدیده غالب انتقال توده-ای نسبت به پدیده پخش در خاک لوم شنی می‌باشد. همچنین با توجه به اینکه سرعت جریان با میزان رطوبت خاک ارتباط مستقیم دارد لذا می‌توان نقاط اوج منحنی رخنه در حجم‌های منفذی بیشتر در مقایسه با حالت غیراشباع را در هر دو نوع خاک مشاهده کرد. منحنی‌های رخنه اندازه‌گیری شده و برآورد شده بروماید با مدل‌های تعادلی و غیرتعادلی در ستون‌های اشباع و غیراشباع خاک لوم‌رسی و لوم شنی در دو حالت



شکل ۲. منحنی‌های رخنه اندازه‌گیری شده و برآورد شده بروماید در ستون‌های خاک لوم‌رسی و لوم شنی اشباع و غیراشباع



شکل ۳. منحنی‌های روخنه اندازه‌گیری شده و برآورد شده بروماید با مدل‌های تعادلی و غیرتعادلی در ستون‌های خاک: الف) حالت معمولی و ب) حالت نیمه لگاریتمی

نتایج تحلیل آماری

نتایج ارزیابی کمی اعتبار مدل‌های تعادلی انتقال توده-ای-پخش (CDE) و غیرتعادلی روان-راکد (MIM) در شبیه‌سازی انتقال بروماید در ستون‌های خاک لومرسی (جنگلی) و لوم‌شنی (مرتعی) در دو حالت اشباع و غیراشباع در جدول ۲ آمده است. مقادیر بزرگ‌تر از ۰/۹۸ ضرایب تبیین (R^2) برای هر دو مدل تعادلی و غیرتعادلی، حاکی از قابلیت و توانایی این مدل‌ها برای شبیه‌سازی انتقال بروماید در ستون‌های خاک لومرسی و لوم‌شنی می‌باشد. ولی مقادیر بزرگ‌تر شاخص‌های آماری ضریب تبیین و مقادیر کوچک‌تر شاخص‌های آماری جذر میانگین مربعات خطا در مدل غیرتعادلی MIM نسبت به مدل تعادلی CDE، بیانگر دقت و کارایی بیشتر مدل روان-راکد (MIM) نسبت به مدل انتقال توده‌ای-پخش (CDE) می‌باشد. منحنی‌های نیمه لگاریتمی شکل ۳ نیز به خوبی این موضوع را تأیید می‌کنند.

نتیجه‌گیری

در این تحقیق، کارایی مدل‌های تعادلی انتقال توده‌ای-پخش (CDE) و غیرتعادلی روان-راکد (MIM) برای شبیه‌سازی انتقال بروماید در ستون‌های کوتاه خاک اشباع و غیراشباع جنگلی (لومرسی) و مرتعی (لوم‌شنی) به صورت نموداری و آماری مورد بررسی و ارزیابی قرار گرفت. برازش بهتر منحنی‌های رخنه اندازه‌گیری شده و برآورد شده بروماید با مدل غیرتعادلی بخصوص در قسمت دم یا انتهایی منحنی‌های رخنه و همچنین مقادیر بزرگ‌تر شاخص‌های آماری ضریب تبیین و مقادیر

کوچک‌تر شاخص‌های آماری جذر میانگین مربعات خطا در مدل غیرتعادلی MIM نسبت به مدل تعادلی CDE، بیانگر دقت و کارایی بیشتر مدل غیرتعادلی می‌باشد. انحراف غلظت‌های برآوردی مدل تعادلی CDE در قسمت انتهایی آن از غلظت‌های اندازه‌گیری شده و مشاهده‌ای نشان داد که انتقال بروماید در خاک‌های لومرسی و لوم‌شنی به صورت انتقال نامتعارف یا غیرفیکسی و غیرتعادلی بوده و مدل غیرتعادلی روان-راکد مناسب‌تر از مدل تعادلی انتقال توده‌ای-پخش برای شبیه‌سازی می‌باشد. با توجه به اینکه نمونه‌ها به صورت دست‌خورده در ستون‌ها جایگزین گشتند لذا می‌توان گفت شرایط ناهمگنی در ستون‌های مورد آزمایش برقرار بوده است و بر اساس گزارش Huang و همکاران (۲۰۰۵) و Berkowitz و همکاران (۲۰۰۸) ناهمگنی، می‌تواند یکی از دلایل توجیه‌کننده کارایی بهتر مدل‌های غیرتعادلی در تحقیق حاضر باشد.

کارایی بیشتر مدل غیرتعادلی روان-راکد نسبت به مدل تعادلی انتقال-پخش در این تحقیق آزمایشگاهی محدود و کنترل شده نمی‌تواند قضاوت محکم و مطمئنی در ارزیابی این مدل‌ها باشد چرا که دقت مدل‌ها در شبیه‌سازی انتقال املاح به پارامترهای مختلف همچون خصوصیات املاح (غلظت، واکنشگر بودن، محافظه‌کار بودن و...)، ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی خاک و شرایط اولیه و مرزی حاکم بر جریان بستگی دارد. بنابراین قضاوت دقیق‌تر، در گرو انجام تحقیقات و آزمایش‌ها در شرایط واقعی و مرزهای و با لحاظ کردن بیشتر پارامترهای مؤثر و دخیل اشاره شده خواهد بود.

Reference:

- Abbasi, F. (2007). Advanced Soil Physics. Tehran University Publications, Tehran [in Persian].
- Arora, B., Mohanty, B.P. and McGuire, J.T. (2011). Inverse estimation of parameters for multidomain flow models in soil columns with different macropore densities. *Water Resour. Res.* 47(4): 1-17.
- Asghari, S., Abbasi, F. and Neyshabouri, M.R. (2011). Effects of Soil Conditioners on Physical Quality and Bromide Transport Properties in a Sandy Loam Soil. *Biosyst. Eng.* 109: 90-97.
- Bear, J. (2013). Dynamics of Fluids in Porous Media, Dover Publications, New York.
- Benson, D.A., Wheatcraft, S.W. and Meerschaert, M.M. (2000a). Application of a fractional advection-dispersion equation. *Water Resour. Res.* 36(6): 1403-1412.
- Benson, D.A., Wheatcraft, S.W. and Meerschaert, M.M. (2000b). The fractional-order governing equation of Lévy motion. *Water Resour. Res.* 36(6): 1413-1423.
- Berkowitz, B., Emmanuel, S., and Scher, H. (2008). Non-Fickian transport and multiple-rate mass transfer in porous media. *Water Resour. Res.* 44: 1-16.

- Berkowitz, B., and Scher, H. (1995). On characterization of anomalous dispersion in porous media. *Water Resour. Res.* 31:1461-1466.
- Berkowitz, B., and Scher, H. (1997). Anomalous transport in random fracture networks. *Phys. Rev. Lett.* 79(20): 4038-4041.
- Berkowitz, B., and Scher, H. (2008). Exploring the nature of non-Fickian transport in laboratory experiments. *Adv. Water Res.* 32(5): 750-755.
- Bond, W.J., and Wierenga, P.J. (1990). Immobile water during solute transport in unsaturated sand columns. *Water Resour. Res.* 26(10): 2475-2481.
- Ersahin, S., Papendick, R.I., Smith, J.L., Keller, C.K., and Manoranjan, V.S. (2002). Macropore transport of bromide as influenced by soil structure differences. *Geoderma* 108: 207-223.
- Gao, G., Zhan, H., Feng, S., Huang, G., and Mao, X. (2009). Comparison of alternative models for simulating anomalous solute transport in a large heterogeneous soil column. *J. Hydrol.* 377(3-4): 391-404.
- Hillel, D. (2013). *Introduction to Soil Physics*. Elsevier.
- Huang, G., Huang, Q., Zhan, H., Chen, J., Xiong, Y., and Feng, S. (2005). Modeling contaminant transport in homogeneous porous media with fractional advection dispersion equation. *Sci. China Ser. D Earth Sci.* 48: 295-302.
- Jarvis, N., Etana, A. and Stagnitti, F. (2008). Water Repellency, Near-Saturated Infiltration and Preferential Solute Transport in a Macroporous Clay Soil. *Geoderma* 143: 223-230.
- Jury, W.A. (1982). Simulation of solute transport using a transfer function model. *Water Resour. Res.* 18: 363-368.
- Jury, W.A. and Horton, R. (2004). *Soil Physics*. John Wiley & Sons.
- Jury, W.A., and Roth, K. (1990). *Transfer Function and Solute Movement through Soil: Theory and Applications*. Birkhäuser Boston, Cambridge, Mass.
- Kamra, S.K. and Lennartz, B. (2005). Quantitative Indices to Characterize the Extent of Preferential Flow in Soils. *Environmen. Modell. Softw.* 20: 903-915.
- Moradi, G. and Mehdinejadiani, B. (2018). Modelling solute transport in homogeneous and heterogeneous porous media using spatial fractional advection-dispersion equation. *Soil Water Res.* 13(1):18-28.
- Morsali, S., Babazadeh, H., Shahmohammadi-Kalalagh, S. and Sedghi, H. (2019). Simulating Zn, Cd and Ni Transport in Disturbed and Undisturbed Soil Columns: Comparison of Alternative Models. *Int. J. Environ. Res.* 13(4), 721-734.
- Pang, L. and M.E. Close. (1999). Non-equilibrium transport of Cd in alluvial gravels. *J. Contam. Hydrol.* 36: 185-206.
- Pang, L., Close, M., Schneider, D., and Stanton, G. (2002). Effect of pore-water velocity on chemical non-equilibrium transport of Cd, Zn, and Pb in alluvial gravel columns. *Contam. Hydrol.* 57: 241-258.
- Perfect, E., Sukop, M.C. and Haszler, E.R. (2002). Prediction of dispersivity for undisturbed soil columns from water retention parameters. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 66: 696-701.
- Safadoust, A., Amiri Khaboushan, E., Mahboubi, A.A., Gharabaghi, B., Mosaddeghi, M.R., Ahrens, B., and Hassanpour, Y. (2016). Comparison of three models describing bromide transport affected by different soil structure types. *Arch. Agron. Soil Sci.* 62(5), pp.674-687.
- Safadoust, A., Mahboubi, A., Mosaddeghi, M.R., Gharabaghi, B., Unc, A., Voroney, P., and Heydari, A. (2012a). Effect of regenerated soil structure on unsaturated transport of *Escherichia coli* and bromide. *J. Hydrol.* 430-431:80-90.
- Shahmohammadi-Kalalagh, S. and Beyrami, H. (2015). Modeling Bromide Transport in Undisturbed Soil Columns with the Continuous Time Random Walk. *Geotech. Geol. Eng.* 33: 1511-1518.
- Shahmohammadi-Kalalagh, S. and Taran, F. (2019). Effect of Initial Concentration and Input Flux on Equilibrium and Non-Equilibrium Transport of Zn in Soil Columns. *Int. J. Environ. Sci. Te.* 16(11): 7565-7572.
- Shahmohammadi-Kalalagh, Sh. and Taran, F. (2020). Efficiency of Physical Equilibrium and Non-Equilibrium Models for Simulating Contaminant Transport in Laboratory-Scale. *Iran. J. Chem. Chem. Eng., (IJCCE)*.
- Shahmohammadi-Kalalagh, S., Beyrami, H. and Taran, F. (2021). Bromide Transport through Soil Columns in the Presence of Pumice. *Iran. J. Chem. Chem. Eng., (IJCCE)*.
- Toride, N., Inoue, M. and Leij, F. (2003). Hydrodynamic dispersion in an unsaturated dune sand. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 67(3): 703-712.
- Zhen, Q., Zheng, J., He, H., Han, F. and Zhang, X. (2016). Effects of Pisha Sandstone Content on Solute Transport in a Sandy Soil. *Chemosphere* 144: 2214-2220.



Print ISSN: 2251-7480
Online ISSN: 2251-7400

Journal of
**Water and Soil
Resources Conservation
(WSRCJ)**

Web site:

<https://wsrcj.srbiau.ac.ir>

Email:

iauwsrcj@srbiau.ac.ir
iauwsrcj@gmail.com

**Vol. 11
No. 3
Spring 2022**

**Received:
2021-10-14**

**Accepted:
2021-11-21**

Pages: 77-88



Evaluating Equilibrium and Non-Equilibrium Bromide Transport in Forest and Rangeland Soils on a Laboratory-Scale

Nima Golabizadeh¹, Mohammad Reza Dalalian², Shahram Shahmohammadi-Kalalagh^{3*},
Maryam Hajrasouli³ and Siamak Saedi³

- 1) Ph.D. Candidate, Department of Soil Science, Tabriz Branch, Islamic Azad University, Tabriz, Iran.
 - 2) Assistance Professor, Department of Soil Science, Tabriz Branch, Islamic Azad University, Tabriz, Iran.
 - 3) Associate Professor, Department of Water Sciences and Engineering, Tabriz Branch, Islamic Azad University, Tabriz, Iran.
 - 4) Assistance Professor, Department of Soil Science, Tabriz Branch, Islamic Azad University, Tabriz, Iran.
 - 5) Assistance Professor, Department of Soil Science, Tabriz Branch, Islamic Azad University, Tabriz, Iran.
- *Corresponding author email: shahmohammadi_sh@iaut.ac.ir

Abstract:

Background and Aim: to better management of solute transport in porous media, it is essential to recognize their transport behavior using appropriate models. In this research, convection-dispersion equation (CDE) and mobile-immobile model (MIM), as physical equilibrium and non-equilibrium models, respectively, were used to simulate the bromide transport through saturated and unsaturated forest soil, with clay loam texture, and rangeland soil, with sandy loam texture, columns (diameter of 6 and height of 10 cm).

Method: to obtain the BTCs, the PVC soil columns with a height of 10 and a diameter of 6 cm were prepared. The breakthrough experiment was carried out in near saturation and saturated condition under a water head of -1 and 3 cm, respectively. The soil columns were saturated from the bottom with a $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ solution of 0.01 molar as the background solution. At near saturation, the CaBr_2 solution with a concentration of 0.01 M equal to a pore volume was injected into the saturated columns of the background solution through the infiltration disk. A Mariotte bottle was used to establish a constant water head. After CaBr_2 injection started, the effluents with a volume of 0.1 pore volume were collected at different times, and their bromide concentrations were determined using a pH-meter equipped with a bromide selector electrode. After the complete injection of CaBr_2 , the steady-state saturated flow of the background solution was re-established. The experiment continued until the bromide concentration in the effluent were almost zero. The measured concentrations, by dividing by the initial concentration, were converted to relative concentrations (C/C_0). Then the BTCs was plotted as C/C_0 versus time or the number of pore volumes.

Results: The values of mass transfer coefficient ($\omega < 100$) and mobile water fraction ($\beta < 1$) as an indicator for determining the equilibrium and non-equilibrium indicated that bromide transport behavior within these columns was anomalous or non-Fickian transport. Hence, the non-equilibrium or the mobile-immobile model (MIM) is suitable and more efficient than the Fickian-based CDE model. The fitted breakthrough curves (BTCs) and the higher determination coefficient (R^2) and the lower root mean square error (RMSE) values of the MIM model compared to those of the CDE confirmed the effectiveness of the MIM model in simulating bromide transport in the forest and rangeland soil columns.

Conclusion: Better fit of measured and estimated breakthrough curves of bromide with non-equilibrium model compared to CDE equilibrium model, especially in the tail of breakthrough curves indicates more accuracy and the should be added efficiency of the non-equilibrium model. Given that the samples were replaced in the columns as disturbed, it can be said that heterogeneity conditions were established in the columns experiments. According to Huang et al. (2005) and Berkowitz et al. (2008), heterogeneity could be one of the reasons to justify the better performance of non-equilibrium models in the present study. The high efficiency of the non-equilibrium model compared to the equilibrium model in this controlled laboratory research cannot be a reliable judgment in evaluating these models. Accurate judgment will depend on conducting research and experiments in real and field conditions, taking into account more effective parameters.

Keywords: Anomalous transport; Breakthrough curve; CDE model; Fickian-transport; MIM model