

土壤溶质迁移的指数函数模型

魏峰, 王全九

(西安理工大学, 西安 710048)

摘要:边界层方法是描述土壤溶质迁移的简单方法,通过边界层距离与时间的关系可以估计溶质迁移参数。基于边界层方法,研究了土壤溶质迁移的数学模拟及相应参数估计问题。假定土壤溶质浓度剖面为指数函数,得到了描述溶质浓度分布的指数函数模型。各参数对边界层距离的影响分析表明,应选取较小的孔隙水流速度、短历时推求土壤溶质迁移参数;对不同模型预测土壤溶质分布进行比较,结果表明,在短距离处指数型解与精确解的误差比其它都要小。误差分析表明了指数函数模型的有效性和实用性。

关键词:对流弥散方程;边界层方法;指数函数模型;土壤溶质迁移;参数估计

中图分类号:S152.7⁺2

文献标识码:A

文章编号:1005-3409(2012)05-0230-05

Exponential Function Model of Soil Solute Transport

WEI Feng, WANG Quan-jiu

(Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, China)

Abstract: The boundary layer theory is a simple model to describe solute transport in soil. The solute transport parameters can be estimated through the boundary layer changes over time. Modeling the solute transport in soil and estimating the transport parameters are the important goals of this research based on the boundary layer method. A soil solute transport exponential function model was developed based on assumption of exponential concentration profile. The effects of all parameters on boundary layer distance with time were analyzed. The results showed that the smaller pore-water velocity and the shorter duration should be selected to compute soil solute transport parameters. Equations describing soil solute concentration profile were compared with an exact solution. The results indicated that the errors of exponential solution were less than others at the shorter duration. The proposed model for estimating parameters and describing solute concentration distribution of solute transport in soil proves to be useful by error analysis.

Key words: convection-dispersion equation; boundary layer method; exponential function model; soil solute transport; parameter estimation

工业“三废”的排放,农业生产中化学物质(化肥、农药等)的大量施用导致了严重的环境污染,威胁到了人类的生命健康。许多专家学者越来越注重研究土壤水分及土壤溶质的迁移规律,建立各种数学模型预测和控制土壤溶质的迁移过程,并估计溶质迁移参数^[1-7]。人们对土壤溶质的迁移机理多以对流-弥散方程(Convection-Dispersion Equation, CDE)描述。而模型中参数的确定又成为土壤溶质迁移研究的一个重要问题。国内外学者投入大量精力,寻求土壤溶质的迁移模式、迁移参数的确定方法^[6-9]。Shao 等^[6]和

Wang 等^[7]在分别假定溶质浓度分布为二、三次多项式和四、五次多项式的基础上,提出了确定 CDE 方程中参数及其近似解的边界层理论模型,研究结果表明,边界层理论可应用于土壤溶质迁移的研究。郑纪勇等^[9]从实验的角度对边界层方法(三次边界层解)进行了研究,认为随时间的增加,边界层方法计算的结果与精确方法计算的结果之间的误差会逐渐增大。本文在此基础上,假定土壤溶质浓度剖面为指数函数,得到描述溶质浓度分布的指数函数模型。分析各参数对边界层距离的影响以及不同模型预测土壤溶质分布情形。

收稿日期:2012-01-03

修回日期:2012-03-26

资助项目:国家重点基础研究发展计划资助(2011CB411903);国家自然科学基金资助项目(51179150)

作者简介:魏峰(1973—),男,陕西扶风人,讲师,博士生,从事土壤溶质运移数学模拟研究。E-mail:weifxd@163.com

通信作者:王全九(1964—),男,内蒙古丰镇人,博士,教授,博士生导师,主要从事土壤物理与溶质运移研究。E-mail:wquanjiu@163.com

1 相关理论

稳态水流条件下,均质土壤一维瞬态溶质迁移通常由对流—弥散方程(CDE)来描述:

$$R \frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v \frac{\partial c}{\partial x} \quad (1)$$

式中: c ——土壤溶质浓度; x ——坐标; t ——时间; v ——平均孔隙水流速; D ——弥散系数; R ——延迟因子。

初始条件和边界条件为:

$$c(x, 0) = 0 \quad (2)$$

$$(-D \frac{\partial c}{\partial x} + vc) |_{x=0} = vc_0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial c}{\partial x} |_{x=\infty} = 0 \quad (4)$$

式中: c_0 ——初始溶质浓度。

Shao 等假定土壤溶质迁移存在边界层,且土壤溶质浓度分布可以用二次或三次幂函数表示。同时在边界层处,土壤溶质浓度应符合下列条件:

$$c[d(t), t] = \frac{\partial c[d(t), t]}{\partial x} = \frac{\partial^2 c[d(t), t]}{\partial x^2} = 0 \quad (5)$$

土壤溶质迁移符合质量守恒定律,累计输入量应等于土壤溶质浓度剖面的积分,即:

$$I_s(t) = \int_0^{d(t)} c(x, t) dx \quad (6)$$

对方程(1)进行从 0 到 $d(t)$ 积分,并结合式(3), (5), (6)可得

$$I_s(t) = \int_0^{d(t)} c(x, t) dx = \frac{vc_0}{R} t \quad (7)$$

由上述条件 Shao 等获得了土壤溶质浓度剖面表达式。对于二次幂函数,浓度剖面 and 边界层距离为:

$$c(x, t) = \frac{vd(t)c_0}{vd(t) + 2D} [1 - \frac{x}{d(t)}]^2 \quad (8)$$

$$d(t) = \frac{3vt}{2R} + \sqrt{(\frac{3vt}{2R})^2 + \frac{6Dt}{R}} \quad (9)$$

对于三次幂函数,浓度剖面 and 边界层距离为:

$$c(x, t) = \frac{vd(t)c_0}{vd(t) + 3D} [1 - \frac{x}{d(t)}]^3 \quad (10)$$

$$d(t) = \frac{2vt}{R} + \sqrt{(\frac{2vt}{R})^2 + \frac{12Dt}{R}} \quad (11)$$

为进一步比较描述土壤溶质浓度的边界层方法, Wang 和 Horton 在假定一定边界层距离条件的基础上推求出了四次和五次幂函数的边界层解。对于四次幂函数,浓度剖面 and 边界层距离为:

$$c(x, t) = \frac{vd(t)c_0}{3vd(t) + 8D} [3 + \frac{x}{d(t)}] [1 - \frac{x}{d(t)}]^3 \quad (12)$$

$$d(t) = \frac{15vt}{8R} + \sqrt{(\frac{15vt}{8R})^2 + \frac{10Dt}{r}} \quad (13)$$

对于五次幂函数,浓度剖面 and 边界层距离为

$$c(x, t) = \frac{vd(t)c_0}{3vd(t) + 10D} [3 + \frac{2x}{d(t)}] [1 - \frac{x}{d(t)}]^4 \quad (14)$$

$$d(t) = \frac{9vt}{4R} + \sqrt{(\frac{9vt}{4R})^2 + \frac{15Dt}{R}} \quad (15)$$

基于 Shao 等与 Wang 和 Horton 的思想,假定土壤溶质迁移的浓度剖面为指数函数,得到了描述溶质浓度分布的指数函数模型。

假定土壤溶质浓度分布可以用指数函数表示:

$$c(x, t) = a_1(t)x \exp[-a_2(t)x] + a_3(t) \quad (16)$$

在边界层处,土壤溶质浓度应符合下列条件:

$$c[d(t), t] = \frac{\partial c[d(t), t]}{\partial x} = 0 \quad (17)$$

根据方程(3)和式(17)可得方程(16)的系数:

$$a_1 = \frac{vc_0 \exp(1)}{D \exp(1) + vd(t)}, a_2 = \frac{1}{d(t)},$$

$$a_3 = \frac{vc_0 d(t)}{D \exp(1) + vd(t)} \quad (18)$$

将式(18)代入方程(16)即得 n 次幂函数的土壤溶质浓度剖面:

$$c(x, t) = \frac{vd(t)c_0}{D \exp(1) + vd(t)} \{1 - \frac{x}{d(t)} [\exp(1)]^{1 - \frac{x}{d(t)}}\} \quad (19)$$

方程(19)当 $0 \leq x < d(t)$ 时成立,当 $x \geq d(t)$ 时 $c(x, t) = 0$ 。

结合方程(19)和(7)可得 n 次幂函数的土壤溶质边界层距离:

$$d(t) = \frac{vt}{2[3 - \exp(1)]R} + \sqrt{(\frac{vt}{2[3 - \exp(1)]R})^2 + \frac{\exp(1)Dt}{[3 - \exp(1)]R}} \quad (20)$$

对流—弥散方程(1)的精确解^[10]为

$$\frac{c(x, t)}{c_0} = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}[\frac{Rx - vt}{2(DRt)^{0.5}}] + (\frac{v^2 t}{\pi DR})^{0.5} \exp[-\frac{(Rx - vt)^2}{4DRt}] - f(x, t) \quad (21)$$

$$f(x, t) = \frac{1}{2} (1 + \frac{vx}{D} + \frac{v^2 t}{DR}) \exp(\frac{vx}{D}) \operatorname{erfc}[\frac{Rx + vt}{2(DRt)^{0.5}}]$$

式(19)是对流—弥散方程(1)的一种广义近似解,相比较边界层解(19)比精确解(21)表示简单,应用方便。

2 结果与分析

2.1 各参数对边界层距离随时间变化的影响

由式(20)可见边界层距离是时间的增函数,但边界层距离随时间的增加受各参数的影响。

2.1.1 R 对边界层距离随时间变化的影响 对于给定的水流速度(v)和弥散系数(D),随着延迟因子的

增加,溶质锋面运动曲线下移,边界层距离减小(图 1)。说明 R 的增加降低了溶质迁移的速度。

2.1.2 D 对边界层距离随时间变化的影响 对于较小的孔隙水流速度(v),当弥散系数(D)较小时边界层距离随时间缓慢增加,而当弥散系数(D)较大时边界层距离随时间增加比较快。这说明对较小的孔隙水流速度,弥散系数(D)对边界层距离影响最大(图 2a)。对较大的孔隙水流速度(v),弥散系数(D)对边界层距离影响不太大(图 2b 和 2c)。取 $v=0.2$ 时 $D=0.1$ 、 $D=0.01$ 和 $D=0.0013$ 条线几乎重合,这时边界层

距离主要由孔隙水流速度(v)影响着(图 2b—2c)。

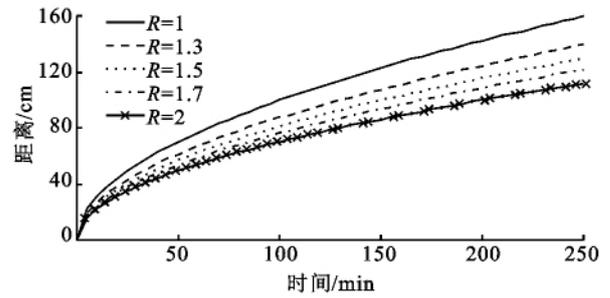


图 1 R 对边界层位置的影响
 $v=0.01$ cm/min, $D=10$ cm²/min

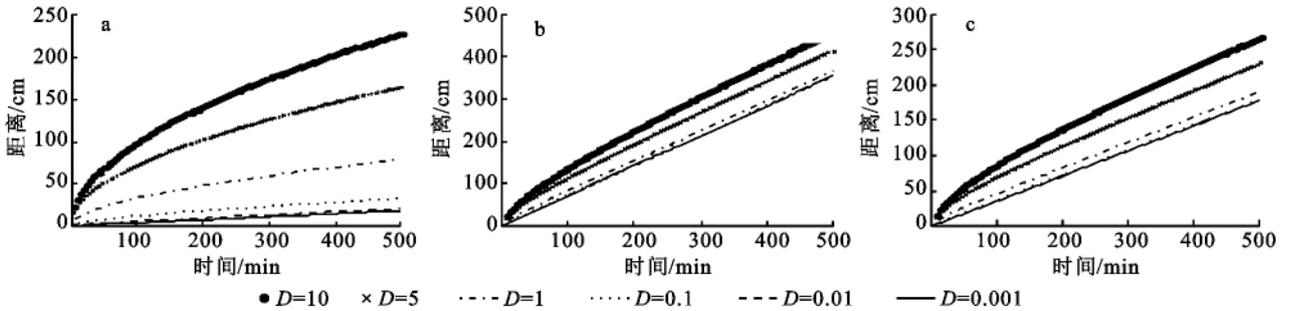


图 2 D 对边界层位置的影响

a: $v=0.01$ cm/min, $R=1$; b: $v=0.2$ cm/min, $R=1$; c: $v=0.2$ cm/min, $R=2$

因为边界层距离也是关于弥散系数(D)增函数, 而且有:

$$\lim_{D \rightarrow 0} d(t) = \lim_{D \rightarrow 0} \left\{ \frac{vt}{2[3 - \exp(1)]R} + \sqrt{\left(\frac{vt}{2[3 - \exp(1)]R}\right)^2 + \frac{\exp(1)Dt}{[3 - \exp(1)]R}} \right\} = \frac{vt}{[3 - \exp(1)]R} \quad (22)$$

所以对于给定的孔隙水流速度(v),无论是惰性非吸附性溶质($R=1$)还是吸附性溶质($R \neq 1$),随着弥散系数(D)的减小,溶质锋面运动曲线逐渐下移,并越来越趋近于直线, $d(t) = \frac{vt}{[3 - \exp(1)]R}$ (图 2)。

2.1.3 v 对边界层距离随时间变化的影响 对较小的弥散系数(D),当孔隙水流速度(v)较小时边界层距离随时间缓慢增加,而当孔隙水流速度(v)较大时边界层距离随时间增加比较快。这说明对较小弥散系数(D),孔隙水流速度(v)对边界层距离影响最大,如图 3a。对较大的弥散系数(D),孔隙水流速度(v)对边界层距离影响不大(如图 3b—3c)。取 $D=2$ 时 $v=0.01$ 、 $v=0.005$ 和 $v=0.001$ 三条线几乎重合,这时边界层距离主要由弥散系数(D)影响着。

因为边界层距离也是关于孔隙水流速度(v)增函数, 而且有:

$$\lim_{v \rightarrow 0} d(t) = \lim_{v \rightarrow 0} \left\{ \frac{vt}{2[3 - \exp(1)]R} + \sqrt{\left(\frac{vt}{2[3 - \exp(1)]R}\right)^2 + \frac{\exp(1)Dt}{[3 - \exp(1)]R}} \right\}$$

$$\sqrt{\left\{ \frac{vt}{2[3 - \exp(1)]R} \right\}^2 + \frac{\exp(1)Dt}{[3 - \exp(1)]R}} = \frac{\exp(1)D}{[3 - \exp(1)]R} t^{0.5} \quad (23)$$

所以对给定的弥散系数(D),无论是惰性非吸附性溶质($R=1$)还是吸附性溶质($R \neq 1$),随孔隙水流速度(v)的减小,溶质锋面运动曲线逐渐下移,并越来越趋近于抛物线 $d(t) = \frac{\exp(1)D}{[3 - \exp(1)]R} t^{0.5}$ (图 3)。

2.1.4 弥散度(D/v)对边界层距离随时间变化的影响 实验室土壤柱弥散度($a=D/v$)为 0.5~2 cm;田间土壤弥散度为 5~20 cm;而对于区域地下水弥散度可能达到很大的值。刘春平和邵明安^[11]的研究表明,对于一个给定的孔隙水流速度 $v=0.003$ cm/min,锋面深度随弥散度的增加而增加,弥散度在 10~40 cm 比在 0.5~10 cm 范围溶质锋面深度增加要快;对给定的弥散系数 $D=0.03$ cm²/min,当弥散度从 0.5 cm 到 10 cm 增加时,锋面深度有一个小的增加,当弥散度从 10 cm 到 40 cm,锋面深度增加更快。这意味着当 v 达到一个较大值时,对锋面运动有一个较大的影响。实际上,对于一个给定的孔隙水流速度,锋面深度随弥散度的增加而增加(图 4);对于一个给定的弥散系数,锋面深度随弥散度的增加而减小(图 4)。由图 4 可知,无论是惰性非吸附性溶质($R=1$)还是吸附性溶质($R \neq 1$),弥散度对边界层距离的影响没有一定规律。

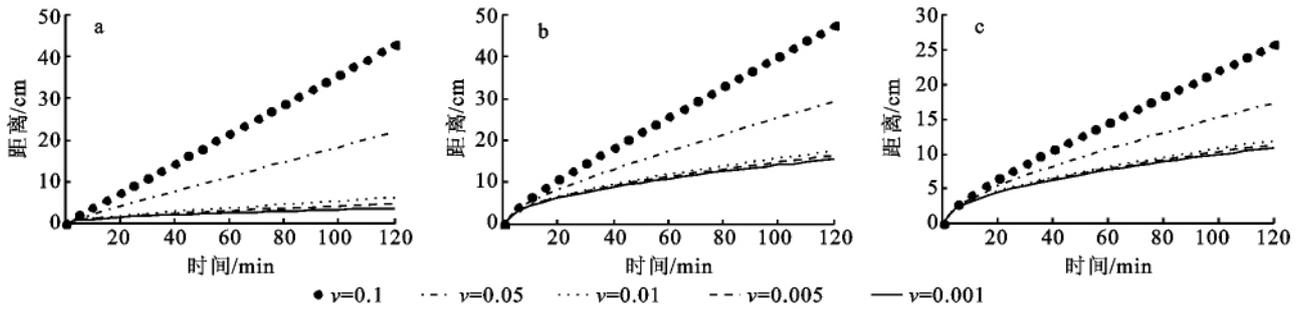


图 3 ν 对边界层位置的影响

a: $D=0.01 \text{ cm}^2/\text{min}, R=1$; b: $D=0.2 \text{ cm}^2/\text{min}, R=1$; c: $D=0.2 \text{ cm}^2/\text{min}, R=2$

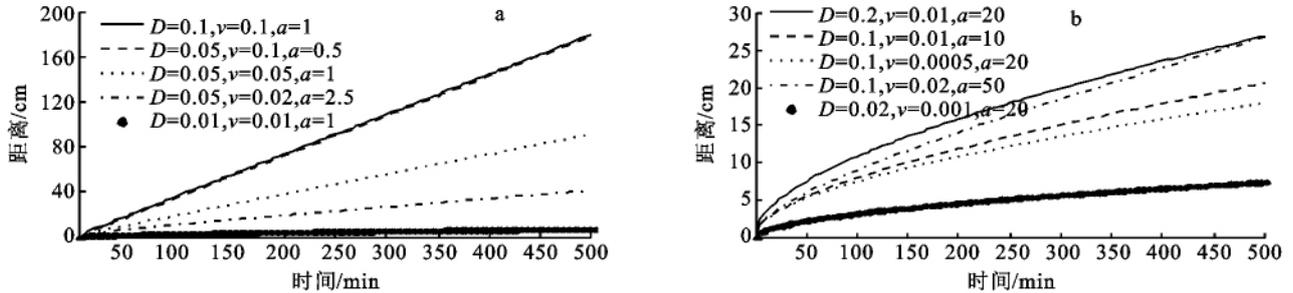


图 4 a 对边界层位置的影响(a) $R=1$; (b) $R=2$

2.2 边界层解与精确解比较

边界层解只是一个近似解,下面我们将其与精确解作一比较。Shao 等比较了二、三次边界层解与精确解,认为边界层解和精确解相近。Wang 等分析了三、四、五次边界层解与精确解,认为它们大多情况下也与精确解相近,有些情况下五次边界层解比其他较好。他们在短距离处并且只在某一时刻作了比较分析。在较大尺度且在多时刻对边界层解与精确解作分析比较发现,对较小的孔隙水流速度,时间较短时三、五次和指数型边界层解与精确解都很相近,指数

模型要好于其它,但随着时间的增加误差越来越大,误差的变化和延迟因子及弥散系数的变化又有很大关系(图 5a—c)。从图 5d—f 可见,对较大孔隙水流速度,边界层解与精确解误差与弥散系数有很大关系。弥散系数越小边界层解与精确解误差越大,这时二次边界层解要好于其它(图 5d—f);而弥散系数越大边界层解与精确解误差越大小,特别是在小时间段,三、五次和指数模型边界层解要好于其它(图 5e)。相同条件下,用边界层方法对吸附性溶质的浓度模拟要比非吸附型溶质要好(图 5c—f)。

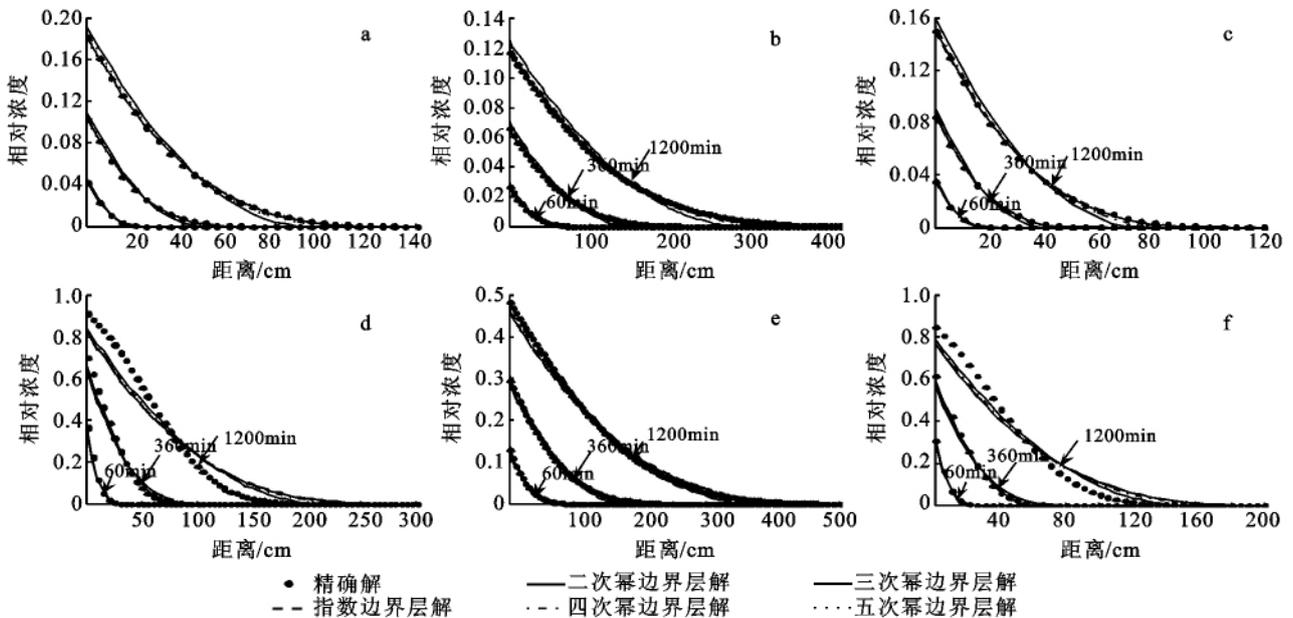


图 5 边界层解与精确解比较

a: $R=1, D=1 \text{ cm}^2/\text{min}, \nu=0.005 \text{ cm}^2/\text{min}$; b: $R=1, D=10 \text{ cm}^2/\text{min}, \nu=0.01 \text{ cm}^2/\text{min}$; c: $R=1.5, D=1 \text{ cm}^2/\text{min}, \nu=0.005 \text{ cm}^2/\text{min}$; d: $R=1, D=1 \text{ cm}^2/\text{min}, \nu=0.05 \text{ cm}^2/\text{min}$; e: $R=1, D=10 \text{ cm}^2/\text{min}, \nu=0.05 \text{ cm}^2/\text{min}$; f: $R=1.5, D=1 \text{ cm}^2/\text{min}, \nu=0.05 \text{ cm}^2/\text{min}$

对边界层与精确解的误差作分析,对较小孔隙水流速度,在长距离处,五次边界层与精确解的误差比其他小;而在短距离处,指数型边界层几乎比其他都要小。对较大孔隙水流速度,边界层解与精确解受各因素影响较大,它们之间的误差变化较大,没有规律。

2.3 参数的确定

边界层距离是时间、迁移参数的简单初等函数,因此容易通过边界层运动随时间变化估计溶质迁移参数。溶质锋面是一个迁移物质在迁移过程中从无到有的界面,而时域反射仪(TDR)则是一种新的用于溶质迁移研究的设备。溶质锋面未达到一定深度探测点前,TDR 探针所探测到的浓度值恒定不变,当浓度值发生变化时,就认为此时为溶质锋面迁移到此探测点的时间。根据不同探测点深度 $d(t)$ 以及相应的时间 t ,结合方程(20),经过数据处理,得到用边界层确定的运移参数弥散系数和延迟因子。综上,边界层解只是一个近似解,虽然表述、计算简单,但也受各因素影响。特别是当孔隙水流速度越大、弥散系数越小边界层解与精确解误差越大。因此运用边界层方法推求相关参数时,应取较小的孔隙水流速度、短历时。

3 结论

边界层解是 CDE 方程的一个简单近似解,通过边界层距离随时间变化可以估计溶质迁移参数。本文将描述土壤溶质迁移的边界层理论推广到一般,得到了描述溶质浓度分布的指数函数模型。从边界层方法在各种参数组合不同时段内的土壤溶质分布模拟来看,在较短历时具有较高的精度,对孔隙水流速度大、弥散系数小的情况模拟的误差大。研究表明指数函数模型应选取较小的孔隙水流速度、短历时推求溶质迁移参数。

参考文献:

[1] van Genuchten M Th, Wagenet R J. Two-site/two-re-

gion models for pesticide transport and degradation: theoretical development and analytical solution[J]. Soil Sci. Soc. Am. J.,1989,53(5):1303-1310.

[2] Wallach R, Grigorin G, Rivlin J. A comprehensive mathematical model for transport of soil-dissolved chemicals by overland flow[J]. Journal of Hydrology,2001,247(1/2):85-99.

[3] Wang Q J, Horton R, Lee J. A simple model relating soil water characteristic curve and solution breakthrough curve[J]. Soil Science,2002,167(7):436-443.

[4] Gao Bin, Walter M T, Steenhuis T S, et al. Rainfall induced chemical transport from soil to runoff; theory and experiments[J]. Journal of Hydrology,2004,295(1/4):291-304.

[5] Pathak D R, Hiratsuka A. An integrated GIS based fuzzy pattern recognition model to compute groundwater vulnerability index for decision making [J]. Journal of Hydro-environment Research,2011,5(2):93-99.

[6] Shao M, Horton R, Miller R K. An approximate solution to the convection-dispersion equation of solute transport in soil[J]. Soil Science,1998,163(5):339-345.

[7] Wang Q J, Horton R. Boundary layer theory description of solute transport in soil[J]. Soil Science,2007,172(11):835-841.

[8] Kool J B, Parker J C, van Genuchten M. Parameter estimation for unsaturated flow and transport model; a review[J]. Journal of Hydrology,1987,91(3/4):255-293.

[9] 郑纪勇,邵明安.应用边界层方法确定溶质迁移参数的实验研究[J].水利学报,2002(1):92-96.

[10] Lindstrom F T, Haque R, Freed V H, et al. Theory on the movement of some herbicides in soil: linear diffusion and convection of chemicals in soils[J]. Environ. Sci. Technol.,1967,1(7):561-565.

[11] 刘春平,邵明安.土壤溶质锋运移的解析解[J].水土保持学报,2001,15(4):82-86.

(上接第 205)

[6] 步兆东,高大鹏,王文智,等.油松刺槐造林成活生长最低土壤水分指标的测定[J].水土保持研究,2003,10(4):170-171,202.

[7] 张继义,付丹,魏珍珍,等.科尔沁沙地几种乔灌木树种

耐受极端土壤水分条件与生存能力野外实地测定[J].生态学报,2006,26(2):467-474.

[8] 马全林,王继和,朱淑娟.降水、土壤水分和结皮对人工梭梭(*Haloxylon ammodendron*)林的影响[J].生态学报,2007,27(12):5057-5067.