

土壤中溶质运移的特性及模型研究

张红梅

(河海大学水利水电工程学院 ,江苏 南京 210098)

摘要 综述近年来土壤中溶质运移的机理、溶质的吸附模型和溶质运移数学模型等方面的研究现状 ,并在现有数学模型的基础上 ,探讨了这些模型目前需要解决的问题及未来发展趋势。
关键词 土壤 ;溶质运移 ;数学模型
中图分类号 S152.9 **文献标识码** :A **文章编号** :1006-7647(2004)07-0108-03

随着工农业生产的迅速发展和社会人口的不断增长 ,工业废水大量排放 ,农药和化肥大面积施用 ,生活垃圾和污水大量排放 ,污水灌溉 ,核能利用带来核废料日益增多 ,这些污染物向地下入渗使周围土壤环境和地下水水质遭到严重的污染 .这些问题的出现 ,推动了溶质运移研究的发展 .多年来 ,人们一直都在致力于土壤中溶质运移理论及模型的应用研究 .

1 土壤中溶质运移的特性

可溶性物质在土壤中迁移机制主要有对流(或称质流)及分子扩散和机械弥散 ,它们之间又相互联系 .

1.1 溶质的对流运移

溶质的对流运移是指溶液中的溶质完全随着水流向前移动的溶质运动 .对流运移可以发生在饱和土壤和非饱和土壤中 ,也可以在稳态水流或非稳态水流下发生 .伴随着溶液运动产生的溶质对流通量 J_c 可表示为^[1]

$$J_c = qC = - \frac{KdH}{dx}C \tag{1}$$

式中 : $q = -K \frac{dH}{dx}$ 为土壤水通量 , K 为导水系数 , $\frac{dH}{dx}$ 为水头梯度 ; C 为单位体积土壤水中溶质的量 ,即溶质的浓度 . J_c 表示通过土壤单位截面积溶液中溶质的量 .

1.2 溶质的分子扩散

溶质的扩散^[1]是指离子或分子不规则运动引起的混合和分散作用 ,它是由浓度梯度引起的 ,即使没有流动 ,溶质也会从浓度高的地方扩散到浓度低的地方 .由 Fick 定律 ,扩散通量 J_d 正比于浓度梯度 ,即

$$J_d = - D^* \frac{dC}{dx} \tag{2}$$

式中 : J_d 为土壤中溶质的扩散通量 ; D^* 为溶质的有效扩散系数 .对于土体中溶质扩散而言 ,有效扩散系数 D^* 远小于自由水体中溶质的扩散系数 D_0 .这主要是由于液相仅占土壤总体积的一部分 ,扩散面比较小 .研究表明^[2] , D^* 还与含水率和浓度 C 本身有关 .实际应用中 ,对土壤溶质扩散过程多描述为

$$J_d = \theta D_s \frac{dC}{dx} \tag{3}$$

式中 : D_s 为扩散系数 , $D_s = D_0 \tau$, τ 为弯曲因子 ,一般取值为 0.3 ~ 0.7 .

1.3 溶质的机械弥散

水在多孔介质中运动时 ,位于孔隙中心的运动速度最大 ,而在孔壁上 ,由于摩阻的影响 ,速度变小 ,同一孔隙的不同地点流速大小不同 ,而且孔隙是弯弯曲曲的 ,流动方向也不断变化 ,因而使流进的溶液与原先的溶液发生了混合 ,与分子扩散一样 ,不同浓度的溶液混合 ,同样使溶质的浓度平均化 ,因此称为机械弥散^[1] .机械弥散是由于流速的大小和方向不同引起的 ,当流速适当大时 ,机械弥散的作用大大超过分子扩散作用 ,但当流速很小时 ,分子扩散便是主要的 .机械弥散过程一般表达式为 : $J_h = - nD_h \text{grad} C$, D_h 称为机械弥散系数 .

由于扩散与弥散从效果而言是类似的 ,于是两个作用叠加 ,合为一项统称为水动力弥散系数 ,记为 D ,即 $D = D^* + D_h$.

2 基础溶质运移模型

2.1 几何模型

几何模型是用来研究水盐运动最早的模型之

作者简介 张红梅(1966—) ,女 ,山西大同人 ,博士研究生 ,从事环境与岩土工程渗流研究 .

一,该模型对土壤中溶质运移过程进行了充分简化,其物理几何意义十分明确.

a. 活塞流模型. 活塞流模型是由土壤中水分运动活塞流模型发展而来的,是理想的溶质运移物理模型之一. 其基本假定为:①土壤孔隙是一个直径为 D 的圆形直管;②溶质和水以同一速度 v 流动,不考虑流速分布和土壤与溶质的反应;③不考虑分子扩散作用;④不考虑土体结构变化.

b. 单毛管理论模型. 单毛管理论也称为管流理论,将活塞模型中沿横断面的流速分布假定为层流就成为单毛管模型.

c. 毛管束模型. 毛管束模型根据土壤水分特征曲线,将土壤看作一系列粗细不等的毛管,成为毛管束组合体. 该模型的假定为:①土壤由一系列粗细不等的毛管组成,用管径分布来反映土壤水分特征;②溶质在土壤中迁移主要是对流,分子扩散作用很弱,可忽略不计;③土壤中的水分为可动水和不可动水两部分,两者之间质量交换处于瞬态平衡状态;④土体结构不发生变化.

2.2 确定性数学模型

2.2.1 对流弥散模型(CDE 模型)

这是描述溶质运移最常用、最基本的数学模型,其基本控制方程为

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v \frac{\partial C}{\partial z} \quad (4)$$

式中: C 为溶质浓度; D 为水动力弥散系数; v 为孔隙水流速度; z 为垂向坐标,向下为正; t 为时间.

该模型反映了所有流体均参与了流动过程,但没有考虑介质与水流之间的相互作用,实际上发生在土壤中的溶质运移受到多种因素的影响. 如考虑固相吸附时溶质运移的数学模型,可表述为

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\rho}{\theta} \frac{\partial S}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v \frac{\partial C}{\partial z} \quad (5)$$

式中: θ 为土壤容积含水量; S 为固相的吸附量; ρ 为固相密度; $\frac{\partial C}{\partial z}$ 为溶质浓度梯度.

模型中固相和液相中溶质浓度之间的关系采用简化吸附形式(忽略气相影响,或不考虑挥发性溶质),主要有平衡等温吸附和非平衡吸附形式(动力吸附模式). 平衡吸附主要是反映固液相之间溶质交换速率要比溶液中溶质浓度的变化大得多的过程,而非平衡吸附则是反映相反的过程. 根据吸附量 S 与溶质浓度 C 的关系,主要分为以下几种模型^[2]:

a. Herry 线性吸附模型. 表达式为: $S = K_d C$ (K_d 为分配系数),此模型是目前最简单而应用最广的模型,它只适用于低浓度、弱吸附的情况.

b. Freundlich 吸附模型. 表达式为: $S = K_d C^n$,此模型是最早的非线性吸附等温模型,已经广泛用于描述土壤对溶质的吸附,但其应用仅限于一定的浓度范围.

c. Langmuir 吸附模型. 表达式为: $S = \frac{K S_m C}{1 + K C}$,其中 S_m 是土壤溶质的最大吸附量; K 为吸附系数. 此模型特别适用于磷酸盐和重金属等阳离子吸附交换过程.

d. Temkin 吸附模型. 表达式为: $S = b + K_d \log C$,此模型可以在溶液浓度较大的范围内应用,但由于其土壤离子吸附曲线通常并非是由此方程所描述的线形关系,误差比较大.

2.2.2 可动-不动区的数学模型

美国的 Van Genuchten^[3]教授在对流弥散模型的基础上提出了考虑土壤中不动水体影响的动水-不动水体模型. 该模型认为溶质处在动水和不动水体两种孔隙介质中,而且还会在两个区域间相互迁移. 就自然界的土壤而言,能同时考虑动水、不动水区的作用及其相互影响,显得更真实,因此这种模型的理论思路更合理. 该模型的数学表达式^[3]为

$$\begin{cases} \frac{\partial (\theta_m C_m + \theta_{im} C_{im})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[D_{sh} (v_m, \theta_m) \frac{\partial C_m}{\partial z} \right] - \frac{\partial (v_m C_m)}{\partial z} \\ \theta_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \alpha (C_m - C_{im}) \end{cases} \quad (6)$$

式中: θ_m, θ_{im} 分别表示土壤水分流动区和非流动区的含水率; C_m, C_{im} 分别为相应区域的溶质浓度; v_m 为流动区的平均孔隙水流速度; $D_{sh}(v_m, \theta_m)$ 为弥散系数; α 为表示流动区和非流动区溶质浓度关系的一个系数.

已有研究表明:①可动区含水量与总含水量之比是模型中最敏感的参数,大多数研究者^[4]认为参数随含水量的减少而降低. ②对于两区间物质迁移交换系数 α ,Gaudet^[2]认为 α 可由实验中穿透曲线上延迟部分的斜率决定,随含水量的变化波动不大. De Sedit 和 Wierenga 等^[2]拟合出质量迁移系数 α 与可动区平均孔隙水流速 v_m 间的线性关系: $\alpha = 0.042 v_m + 2.2$,即 α 随孔隙水流速的增加而增加,这是因为 α 不仅依赖于分子扩散系数,并且与扩散的距离和扩散时所通过的面积大小有关. 此外, α 还与扩散速率、溶质延迟因子、土柱长度、不流动水的体积和几何形状等因素有关^[3,5]. ③对于弥散系数 D ,Guadet^[3]认为 D 在很大程度上取决于穿透曲线上部分的斜率,且随含水量的降低而减小;Padilla 和 Yeh 等^[3]的实验结果表明, D 与分子扩散关系不大,可忽略,但与平均含水量存在相关关系,当含水量降

低时 D 值增大。

2.3 随机传输函数模型(黑箱模型)

随着地下水溶质迁移研究的不断深入,有些学者在利用对流弥散方程研究生产实际中的溶质迁移问题时,出现了理论值与实测值不符合的现象,他们认为这是由于地下水运动中的不确定性因素较多(例如孔隙介质的不确定性、含水层几何参数的不确定性、溶质迁移过程和运动参数的不确定性等)引起的,因此近 10 多年来随机理论迅速应用于污染物的迁移研究中,并取得了突破性的研究成果^[6~8],对随机理论的研究是从研究含水层非均质性及其尺度效应开始的,随机模型认为溶质在不同深度迁移的通量可通过已知浓度的累积入渗通量来估计,地下水水质的随机模型能更加真实地逼近客观的水文地质条件,Boggs^[9],Mackay^[10]等的野外溶质迁移实验表明,溶质迁移的随机理论可以较好地描述区域溶质运动,随机模型的理论基础是概率论和数理统计,主要分析方法是回归分析法和时间序列法,模型计算的外推时间和精度取决于观测时间的长短和观测资料的数量,随机模型是目前模拟大田溶质运移规律的有效模型,随机模型的数学表达式如下^[3]:

$$\begin{cases} \alpha(l, t) = \int_0^{\infty} C_m(t-t') f(t') \lambda t' \\ f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma t}} \exp\left(-\frac{(\ln t - \mu)^2}{2\sigma}\right) \end{cases} \quad (7)$$

式中: $f(t)$ 为传输函数; $C_m(t-t')$ 为已知浓度的入渗通量,该模型由于对溶质运移的物理条件没有太多限制,所以目前它对模拟大田溶质运移规律非常有效。

3 结 语

根据已有研究成果概述了土壤溶质运移、转化的主要过程,详细描述了土壤溶质吸附模型和土壤溶质运移模型,土壤溶质运移的研究在某些方面还存在不足,如土壤溶质运移的机理、机制、参数的意义及其测定技术,溶质运移理论的应用研究等,人们还没有完全掌握,今后研究的重点应放在进一步研究和改进模型的准确性、灵活性、通用性和操作性;通过室内、室外精密的实验研究,选取模型参数时,不仅应充分考虑土壤内部水、热、气要素,而且要考虑气候、人工因素等的综合作用,有关随机模型模拟多孔介质地下水流及污染物运移方面的研究,在国外发展较为迅速,但在国内基本上还是空白,近二三十年来,由于一些国家对高放射性核废料进行地质处置的关注,部分学者对基岩裂隙介质地下水流及溶质运移模型进行了研究,取得了重要突破^[11],但

应用于解决实际问题的成功实例还很少^[12],因此要进一步加强随机模型的理论研究和实践应用,此外,土壤溶质运移理论的研究应从封闭的室内土柱试验扩展到野外大田观测,以便获取足够的数据资料来确切地描述溶质运移过程,这将大大地促进溶质运移模型的推广应用。

参考文献:

- [1] 孙训正. 地下水污染-数学模型和数值方法[M]. 北京:地质出版社, 1989. 19~21.
- [2] 李广辉, 魏世强. 土壤溶质运移特性研究进展[J]. 土壤通报, 2003, 34(6): 576~580.
- [3] 魏新平, 王文焰, 王全九. 溶质运移理论的研究现状和发展趋势[J]. 灌溉排水, 1998(4): 58~63.
- [4] Griffioen J W, Barry D A, Parlange J Y. Interpretation of two-region model parameters[J]. Water Resources Research, 1998, 34(3): 373~384.
- [5] Bajracharya K, Barry D A. Nonequilibrium solute transport parameters and their physical significance: Numerical and experimental results[J]. Journal of Contamination Hydrology, 1997, 24(1): 185~204.
- [6] Dagan G, Nguyen. A comparison of travel time and concentration approaches to modeling transport by groundwater[J]. Journal Contaminant Hydrology, 1989(4): 79~91.
- [7] Dagan G. Time-dependent macrodispersivity for solute transport in an isotropic heterogeneous aquifers[J]. Water Resource Research, 1988, 24(9): 1451~1500.
- [8] Gupta V K. Fundamental problems in the stochastic convection-dispersion model of solute transport in aquifers and field soils[J]. Water Resources Research, 1986, 22(1): 77~88.
- [9] Boggs J M, Young S C, Bend L M, et al. Field study of dispersion in a heterogeneous aquifer[J]. Water Resource Research, 1992, 28(3): 791~815.
- [10] Mackay D M, Freberg D L, Cherry J A. A natural gradient experiment on solute transport in a sand aquifer[J]. Water Resource Research, 1986, 22(13): 2017~2029.
- [11] Arturo A K, Paul V R, Martin J B. Effect of aperture variations on the dispersion of contaminants[J]. Water Resources Research, 1999, 35(1): 55~63.
- [12] 薛禹群, 吴吉春. 面临 21 世纪的中国地下水模拟问题[J]. 水文地质工程地质, 1999(5): 1~3.

(收稿日期: 2004-03-01 编辑: 熊水斌)

