

土壤溶质运移 CDE 模型参数估计的 一种新方法——截距法*

石 辉 郑纪勇 邵明安

(中国科学院水利部水土保持研究所, 陕西杨凌 712100)

INTERCEPT METHOD—A SIMPLE METHOD FOR ESTIMATING PARAMETERS IN THE CONVECTION-DISPERSION EQUATION BY BREAKTHROUGH CURVE

Shi Hui Zheng Ji-yong Shao Ming-an

(The Institute of Soil and Water Conservation, Chinese Academy of Sciences, and Ministry of Water
Resources, Yangling, Shaanxi 712100, China)

关键词 土壤溶质运移, CDE 模型, 参数估计

中图分类号 S152.72

为了满足日益增长的人口对粮食的需求, 农用化学物质被广泛应用, 这些物质可通过各种途径进入土壤, 因此研究土壤中农用化学物质的运移、转化对于防止水环境污染、促进农用化学物质的高效、发展可持续农业有着重要的意义^[1]。

对流-弥散方程(CDE)是研究土壤溶质运移的一种经典模型, 参数的估计是应用 CDE 方程的一个关键问题。传统估计 CDE 方程参数的方法有统计方法和确定性方法两种。统计方法主要包括最小二乘法、最大似然法和矩分析法^[2-5], 但由于未知因素太多及初值的选择不当, 采用统计方法所得参数不唯一^[6]; 同时, 仅靠曲线拟合也并不能说明模型应用的正确性^[7]。确定性方法有着明确的物理意义和确定的参数值, 在应用过程中得到了进一步的重视。Rifai^[8]和 Elprince^[9]曾提出了利用穿透曲线上某一定点的斜率估计 CDE 方程参数的方法; Fried^[10]利用 CDE 方程近似解与正态分布的关系, 采用穿透曲线上的两个特定点推求参数。Yamaguchi^[11]为了改进这些方法利用试验数据少的缺点, 利用穿透曲线差分法估计 CDE 参数, 但由于弥散系数 D 对浓度的概率密度特别敏感, 因此一般情况下 D 估计误差较大^[12]。Shao 等提出了溶质运移过程的边界层理论估计 CDE 参数的新方法^[13], 为参数的估计提供了一种新的思路, 但在实验中如何确定边界层尚需进一步研究。

穿透曲线是研究土壤溶质运移的一种常用方法, 利用穿透曲线估计 CDE 参数有着现实意义。由于拟合方法存在物理意义不明确的问题, 因此物理意义明确的确定性方法就成为参数估计的一个方向。在本文, 我们从 CDE 方程的解析解出发, 提出了估计 CDE 参数的近似方法——截距法, 并利用实验进行了验证。

* 国家重点基础研究发展规划项目“草地与农牧交错带生态系统重建机理及优化生态-生产范式”(G200018605)资助

1 基本理论

在稳定流下通过均质一维土柱得溶质运移 CDE 方程为:

$$R \frac{\partial c}{\partial t} = D_0 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + u_0 \frac{\partial c}{\partial x} \quad (1)$$

式(1)中, c —溶质浓度, D_0 —水动力弥散系数, u_0 —孔隙流速, R —阻滞因子, t —时间, x —距离。在边界条件和初始条件下

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

$$c(\infty, t) = 0 \quad t > 0 \quad (2b)$$

$$-D \frac{\partial C}{\partial x} + VC \Big|_{x=0} = VC_0 \quad t > 0 \quad (2c)$$

的解析解为^[4]

$$\frac{c(x, t)}{c_0} = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[\frac{x-ut}{2\sqrt{Dt}} \right] + \frac{1}{2} \exp \left(\frac{ux}{D} \right) \operatorname{erfc} \left[\frac{x+ut}{2\sqrt{Dt}} \right] \quad (3)$$

erfc 为余误差函数, 其中

$$u = \frac{u_0}{R}, \quad D = \frac{D_0}{R} \quad (4)$$

大量研究表明, 一般情况下(4)式的第二项可以忽略,

$$Ce = \frac{c(x, t)}{c_0} = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[\frac{x-ut}{2\sqrt{Dt}} \right] \quad (5)$$

(5) 式为 CDE 方程参数估计的 Rifai 方法^[8] 和 Fried 方法^[10] 的基础, 可变化为

$$1 - 2Ce = \operatorname{erf} \left[\frac{x-ut}{2\sqrt{Dt}} \right] \quad (6)$$

对(6)式的两边同时进行逆运算

$$\operatorname{arcerf}(1 - 2Ce) = \frac{x-ut}{2\sqrt{Dt}} \quad (7)$$

$$\sqrt{t} \operatorname{arcerf}(1 - 2Ce) = \frac{x-ut}{2\sqrt{D}} \quad (8)$$

$\operatorname{arcerf}(1 - 2Ce)$ 为误差函数的逆运算, 可通过查表求得。令

$$\xi = \sqrt{t} \operatorname{arcerf}(1 - 2Ce) \quad (9)$$

对于某一固定位置 $x = L$ 处有,

$$\xi = \frac{L}{2\sqrt{D}} - \frac{u}{2\sqrt{D}} t \quad (10)$$

由式(10)可知 ξ 与 t 成线性关系, 由于其截距和斜率仅包含了水动力弥散系数 D , 延滞因子 R , 故可利用其进行参数估计。令 a , b 分别为截距和斜率, 则

$$D = \left(\frac{L}{2a} \right)^2, \quad R = -\frac{au_0}{bL} \quad (11)$$

2 试验验证

供试土壤为黄土高原地区几种代表性土壤——风沙土、黄绵土、黑垆土、土耕层土样。将内径为 4.4 cm 的有机玻璃管一端包一层滤纸, 然后用纱布固定, 装入 2 cm 厚沙层, 随后将风干过 2 mm 筛的土样分层装入柱中, 土柱高度为 20 cm, 控制土壤容重为 1.3 g cm^{-3} 。将土柱置入蒸馏水中一昼夜, 使土柱达到饱和, 且控制土柱上部无明

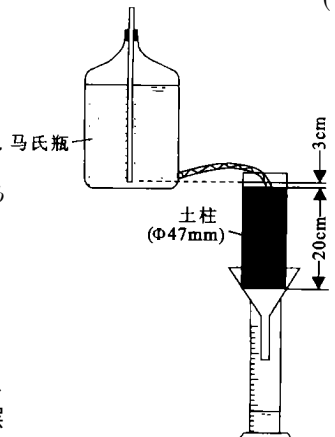


图 1 Cl^- 在土柱中穿透曲线试验装置示意图

显的水层为准。将土柱按图 1 进行 Cl^- 运移实验, 试验用 $CaCl_2$ 溶液浓度为 0.16 mol L^{-1} , 控制水头为 3 cm。收集连续出流溶液, 进行 Cl^- 测定, 并记录对应的时间, 当出流液 Cl^- 浓度与原入渗液浓度相等时停止试验。

对四种土壤穿透曲线按照上述原理进行处理, 其结果见图 2, 从中可以看出, ξ 与 t 有良好的线性关系。根据直线的截距和斜率, 按照(11)式可估计参数 D, R 值。根据估计的参数, 利用近似解析解对四种土壤溶质运移的穿透曲线进行了模拟, 可发现模拟结果与实测结果一致(图 3)。这说明我们提出的截距法可用来估计 CDE 方程参数, 且有较高的精度。截距法是从 CDE 方程的解析解出发而提出的参数估计方法, 具有明确的物理意义且简单易行, 可广泛用于土壤溶质运移 CDE 方程的参数估计。

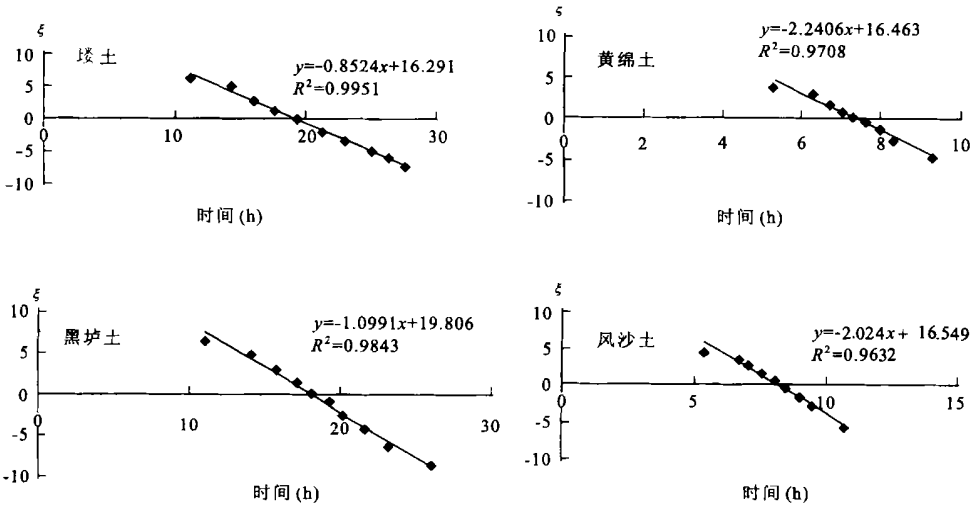


图 2 ξ 与时间 t 的关系

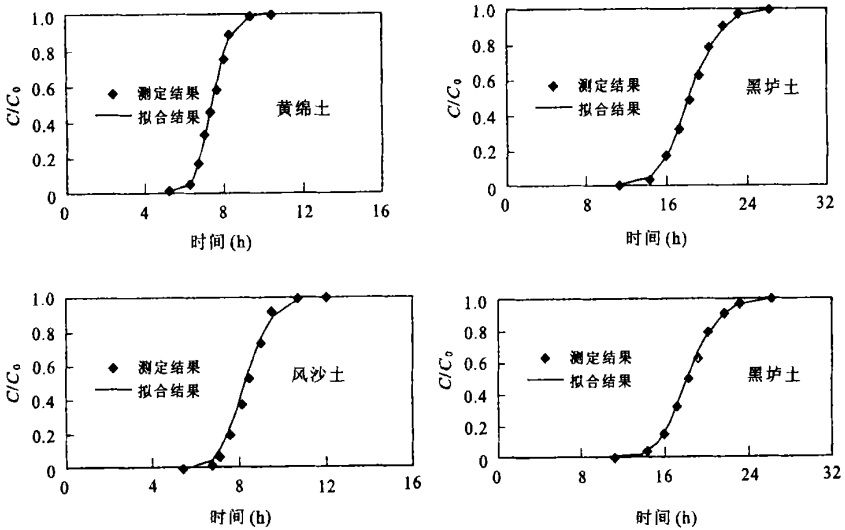


图 3 截距法估计参数拟合结果与实测结果比较

参考文献

1. 石辉, 邵明安. 土壤中农用化学物质的迁移. 世界科技研究与发展, 1999, 21(4): 63~ 68
2. Bresler E, Naor A. Estimating transport parameters in soils by maximum likelihood. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 1987, 51: 870~ 875
3. Jury W A, Sposito G. Field calibration and validation of solute transport models for the unsaturated zone. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 1985, 49: 1 331~ 1 341
4. Parker J C, van Genuchten M Th. Determining transport parameters from laboratory and field tracer experiments. *VA. Agric. Exp. Stn. Bull.*, 1984, No. 84~ 3
5. Toride N, Leij F J, van Genuchten M Th. The CXTFIT Code for estimating transport parameters from laboratory or field tracer experiments. US Salinity Laboratory Agriculture Research Service, US Department of Agriculture, Riverside, California, 1995, No. 137
6. Leij F J, Dane J H. Moment method applied to solute with binary and ternary exchange. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 1992, 56: 667~ 674
7. Rao P S C, Rolston D E, Jersup R E, *et al.* Solute transport in aggregated porous media: Theoretical and experimental evaluation. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 1980, 44: 1 139~ 1 146
8. Rifai M N E, Kaufman W J, Todd D K. Dispersion phenomena in laminar flow through media. *Salinity Eng. Res. Lab.*, Univ. of Calif., Berkeley, 1956, No. 93
9. Elprince A M, Day P R. Fitting solute breakthrough equation to data using two adjustable parameters. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 1977, 41: 39~ 41
10. Fried J J, Combarnous M A. Dispersion in porous media. *Adv. Hydrosci.*, 1971, 7: 169~ 282
11. Yamaguchi T, Moldrup P, Yokosi S. Using breakthrough curves for parameters estimation in the convection—dispersion model of solute transport. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 1989, 53: 1 635~ 1 641
12. 任理, 李保国, 曾凡, 等. 土壤溶质运移两种新的求参方法的应用. *水利学报*, 1999, (11): 1~ 6
13. Shao M, Horton R, Miller P K. An approximate solution to the convection—dispersion equation of solute transport in soil. *Soil Science*, 1998, 163: 339~ 345