

饱和非均质土壤中溶质大尺度运移的两区模型模拟*

高光耀¹ 冯绍元^{1†} 黄冠华^{1,2}

(1 中国农业大学水利与土木工程学院, 北京 100083)

(2 中国农业大学中国-以色列国际农业研究培训中心, 北京 100083)

摘要 目前,用于模拟土壤中溶质运移过程的两区模型(TRM)的研究均集中在实验室的短土柱上,涉及的尺度较小。本研究分别应用两区模型(TRM)、对流-弥散方程(CDE)和分数微分对流-弥散方程(FADE)对 1 250 cm 长一维非均质土柱中 NaCl 的运移过程进行模拟,并分析了 TRM 模型参数的变化特征。结果表明:实验土柱中存在一定的不动水体,与 CDE 和 FADE 相比,TRM 能更好地描述土柱中不同位置处溶质穿透曲线的提前穿透和拖尾特征,表明 TRM 对较大尺度条件下非均质土壤中溶质运移的模拟具有更高的精度;应用 TRM 研究长土柱中溶质的运移问题依然存在弥散系数的尺度效应问题,但 TRM 的弥散尺度效应小于 CDE;TRM 中的可动水体含量可以由土壤的有效孔隙率与总孔隙率的比值来确定;而质量交换系数则与对流时间(x/v_m)之间存在幂函数的相关关系。

关键词 溶质运移;非均质土壤;两区模型;大尺度;不动水体;数值模拟

中图分类号 S152 **文献标识码** A

溶质在土壤中的运移过程非常复杂,溶质的分布不仅与水流运动有关,而且与溶质的性质以及溶质随水流运动过程中所发生的一系列物理、化学和生物化学过程有密切关系,尤其是与土壤的特性(如孔隙结构特征、介质结构的分布等)密切相关^[1]。土壤的孔隙存在形态非常复杂,在死端孔隙、微孔隙、内聚孔隙中存在一定的不动水体,溶质可通过扩散作用出入其中,在溶质运移的模拟研究中不容忽视^[2,3]。

目前常用的描述非均质土壤中溶质运移过程的确定性数学模型主要有对流-弥散方程(Convection-dispersion equation, CDE)、两区模型(Two-region model, TRM)和分数微分对流-弥散方程(Fractional advection-dispersion equation, FADE)。CDE 反映了所有水体均参与了流动过程,将土壤的孔隙特性简化过于简单而难以描述溶质运移中经常出现的提前穿透和拖尾等不规则现象,影响了溶质运移预测的可靠性^[4]。根据 Lévy 运动理论推导的 FADE 考虑溶质的弥散通量与溶质浓度的分数微分梯度成正比,该关系式在一定程度上反映了介质的非均质性对溶质运移的影响,研究结果表明,FADE 较 CDE 能更有效地描述穿透曲线的拖尾现象^[5,6]。但应用 FADE 研究

溶质的运移问题依然存在一定程度的弥散尺度效应^[7],而且 Berkowitz^[8]和 Lu^[9]也讨论了该模型的缺陷。在 CDE 基础上建立起来的 TRM 考虑了不动水体在溶质运移过程中所起的作用,更真实地反映了土壤孔隙状况,对上述的两种不规则现象做出了比较精确的描述,被广泛用来研究室内的饱和及非饱和土壤中溶质运移规律,如 Padilla^[10]、Bond 和 Wierenga^[11]、Li^[12]应用 TRM 分别有效地模拟了饱和与非饱和均质砂土、混有淤泥和黏土的非均质砂土以及层状土壤中溶质运移穿透曲线的全过程。尽管 TRM 在土壤溶质运移的研究中得到很大程度的应用,但这些研究均集中在实验室的短土柱上(土柱长度 < 100 cm),涉及的尺度较小,应用 TRM 研究非均质长土柱中的溶质运移过程目前还未见报道,TRM 对较大尺度上的非均质土壤中溶质运移过程的模拟是否依然有效需要进一步研究,这也可为准确预测污染物在天然土壤和地下水中的运移规律提供理论依据。此外,尽管 TRM 改善了对溶质运移过程的模拟效果,但同时也增加了可动水体含量和质量交换系数两个参数,目前主要是通过实测法和模型反推参数法来确定。目前的实测方法比较复杂,而且做

* 国家重点基础研究发展规划项目(2006CB403406)和教育部长江学者创新团队发展计划(IRT0657)、教育部“新世纪优秀人才支持计划”(NCET-04-0127)资助

† 通讯作者, E-mail: fsy@cau.edu.cn

作者简介:高光耀(1984~),男,湖北仙桃人,博士研究生,研究方向为土壤溶质运移的数值模拟。E-mail: ggy_sl@126.com

收稿日期:2006-10-24;收到修改稿日期:2007-02-13

了一些假设,失去了两区模型的实质,有较大的误差^[13]。如何确定这两个参数以及对参数影响因素的研究也一直是 TRM 研究的热点问题。

为此,本研究应用 TRM 对 1 250 cm 长的一维非均质土柱中不同位置处的 NaCl 穿透曲线进行模拟,并与 CDE 和 FADE 的模拟结果进行比较,探讨 TRM 模拟非均质土壤中溶质运移规律在较大尺度上变化过程的适用性,并分析 TRM 模型参数的变化特征,提出直接确定可动水体含量的方法。

1 材料与方 法

1.1 长土柱溶质运移实验

采用一维非均质长土柱中的 NaCl 运移实验资料^[14]来进行模拟研究。该实验是在室内采用长度为 1 250 cm,横截面为 10 cm × 10 cm 的水平土柱进行的。土柱装填含有黏土、细砂、中砂、粗砂、砾石和卵石(粒径 1 ~ 2 cm)等的土样,装填过程中通过混合形成各种层状、透镜状等不规则的形状使土壤尽可能的具有强非均质性,各种土样的组成比例和非均质土壤在土柱中的分布情况见文献^[14]中的图 1。土柱中土壤从溶质入流端到出流端有从粗质土壤到细质土壤的趋势。实验测得的非均质土柱的总孔隙率约为 0.37。土柱进、出水端分别连接马氏瓶和定水头水箱,以保证形成恒定水头差和稳定流场。用自来水饱和土柱并获得稳定流场条件后,土柱的入流液换成浓度为 6 g L⁻¹的 NaCl 溶液,并开始溶质运移的观测实验。在土柱中每隔 100 cm 处理设电导率测定探头,通过电导率的测定值分别确定各测点不同时刻 NaCl 的实测浓度值。实验过程中,非均质土柱的水流量为 0.239 cm min⁻¹。实验装置和详细过程可参见文献^[14]。到目前为止,该实验为在实验室进行的尺度最大的非均质土柱实验之一。

1.2 溶质运移数学模型

本研究分别用 TRM、CDE 和 FADE 等三种数学模型对长土柱中溶质运移过程进行数值模拟,模型的基本方程分述如下。

1.2.1 对流 - 弥散方程(CDE) 一维稳定流条件下,保守性溶质运移的 CDE 为:

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

式中, C 为溶质浓度 (mg L⁻¹); D 为水力弥散系数 (cm² min⁻¹); v 为平均孔隙流速 (cm min⁻¹); t 为时间变量 (min); x 为距离变量 (cm)。

1.2.2 两区模型(TRM) TRM 依据孔隙大小将土壤水占有的区域分为可动的“动态(Dynamic)”区域和不可动的“停滞(Stagnant)”区域,且可动区域内土壤水流动状态相近或一致。对流和弥散仅被限定在可动区域,不可动区域的溶质仅以扩散形式与可动区域发生质量交换,且假设质量交换速率与两区的溶质浓度差成正比^[15]。不考虑吸附、降解等化学作用时,一维稳定流条件下的 TRM 如下^[15]:

$$\begin{cases} m \frac{\partial C_m}{\partial t} + i_m \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = m D_m \frac{\partial^2 C_m}{\partial x^2} - v_m m \frac{\partial C_m}{\partial x} & (2) \\ i_m \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = (C_m - C_{im}) & (3) \end{cases}$$

式中, m 和 i_m 分别为土壤中可动和不可动区域的体积含水率 (cm³ cm⁻³), 且 $m + i_m = \theta$, 其中 θ 为土壤体积含水率 (cm³ cm⁻³); C_m 和 C_{im} 分别为可动和不可动区域的溶质浓度 (mg L⁻¹); D_m 为可动区域的水动力弥散系数 (cm² min⁻¹); $v_m (= q / m)$ 为可动区域的平均孔隙流速 (cm min⁻¹), q 为水流量 (cm min⁻¹); ϕ 为两区溶质之间的质量交换系数 (min⁻¹)。式 (3) 为表示两区溶质间的质量交换方程。

1.2.3 分数微分对流 - 弥散方程(FADE) 对于保守性溶质,一维稳定流场条件下的 FADE 为^[16]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v \frac{\partial C}{\partial x} + \left(\frac{1}{2} + \frac{\alpha}{2} \right) D \frac{\partial C}{\partial x} + \left(\frac{1}{2} - \frac{\alpha}{2} \right) D \frac{\partial C}{\partial (-x)} \quad (4)$$

式中, D 为水力弥散系数 (cm min⁻¹)。 α 为 Lévy 分布参数且 $1 < \alpha < 2$, 当 $\alpha = 2$ 时, FADE 变为 CDE。

α 为偏度参数且 $-1 < \alpha < 1$, 当 $\alpha = 0$ 时,即为对称的溶质运移的 FADE。

对保守性溶质 NaCl 而言,由于土柱中土样的有机质含量可以忽略,在构建长土柱中溶质运移的 TRM、CDE 和 FADE 等数学模型时,不考虑土壤的吸附作用^[14]。由于饱和土柱的自来水中 NaCl 浓度约为 0.154 g L⁻¹,与注入的 NaCl 溶液浓度相比可以忽略不计,因此溶质的初始浓度设为 0;溶质运移的上边界取 Cauchy 条件,即溶质通量边界;溶质运移的下边界条件取为零浓度梯度边界。

1.3 模型参数的求取

本文应用 CXTFIT2.1 软件^[17]对非均质长土柱中 12 个测点处的溶质穿透曲线进行 CDE 和 TRM 的模拟分析,通过对实验结果的拟合得到模型参数 v 、 D 和 D_m 、 ϕ , 其中 $\phi = m / \theta$ 为可动水体含量。同

时还采用由 Fortran 语言编写的 FADEMain 程序^[16]进行对称的 FADE 模型的模拟,拟合得到 v 、 D 、等参数。模拟结果采用均方根误差 RMSE (Root mean square error) 表示模拟值和实测结果的拟合程度好坏, RMSE 表示如下:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (C_{jm} - C_{je})^2} \quad (5)$$

式中, C_{jm} , C_{je} 分别为实测和模拟浓度值; N 为实测浓度数据个数。

2 模拟结果与讨论

2.1 TRM 模拟结果与分析

表 1 列出了拟合得到的土柱中不同位置处 TRM、CDE 和 FADE 中的模型参数和均方根误差。图 1a、图 1b、图 1c 和图 1d 分别是长土柱中 100 cm、400 cm、600 cm 和 1 000 cm 处溶质穿透曲线实测值与 TRM、CDE 和 FADE 模拟结果比较。

表 1 土柱中不同位置处 TRM、CDE 和 FADE 中的模型参数和均方根误差

Table 1 Estimated values of parameters and root mean square error for TRM, CDE and FADE at different distances of the soil column

距离 Distances x (cm)	两区模型 TRM				对流 - 弥散方程 CDE			分数微分对流 - 弥散方程 FADE			
	可动区域 弥散系数 $D_m^{1)}$ ($\text{cm}^2 \text{min}^{-1}$)	可动 水体 含量 $\phi^{2)}$	质量交 换系数 $3)$ (min^{-1}) ($\times 10^5$)	均方根 误差 RMSE	平均孔隙 流速 $v^{4)}$ (cm min^{-1})	弥散系数 $D^{5)}$ ($\text{cm}^2 \text{min}^{-1}$)	均方根 误差 RMSE	平均孔隙 流速 v (cm min^{-1})	弥散系数 D (cm min^{-1})	L éy 分布 参数 $6)$	均方根 误差 RMSE
100	3.22	0.579	2.39×10^{-5}	0.045 8	1.120	3.10	0.045 5	—	—	—	—
200	8.23	0.543	15.1	0.052 1	1.129	14.06	0.060 1	1.15	2.757	1.661	0.056 2
300	6.12	0.560	18.8	0.033 2	1.054	13.42	0.061 6	1.07	2.999	1.611	0.056 2
400	9.92	0.566	12.4	0.046 7	1.045	23.28	0.062 9	1.00	7.451	1.798	0.076 3
500	8.04	0.531	8.22	0.036 0	1.153	20.45	0.053 4	1.16	9.109	1.838	0.051 3
600	21.70	0.526	8.25	0.019 9	1.136	71.89	0.054 2	1.14	11.01	1.660	0.045 8
700	142.99	0.767	1.85	0.033 8	0.817	168.50	0.034 6	0.81	26.66	1.696	0.036 2
800	87.57	0.571	2.87	0.038 1	1.083	149.10	0.046 0	1.05	29.59	1.750	0.043 0
900	72.99	0.624	1.78	0.037 2	0.997	95.91	0.041 9	1.00	23.04	1.760	0.039 1
1 000	56.85	0.666	3.57	0.025 4	0.902	95.64	0.037 2	0.90	22.98	1.780	0.034 1
1 100	77.65	0.673	3.09	0.024 3	0.895	118.20	0.030 1	0.90	22.43	1.752	0.030 6
1 200	60.48	0.690	2.94	0.033 0	0.880	96.67	0.037 5	0.89	17.06	1.750	0.041 9
均值 Mean	46.31	0.608	7.17	0.035 5	1.018	72.27	0.047 1	1.01	15.92	1.732	0.047 0
最小值 Minimum	3.22	0.526	1.78	0.019 9	0.817	3.10	0.030 1	0.81	2.757	1.611	0.030 6
最大值 Maximum	142.99	0.767	18.8	0.052 1	1.153	168.50	0.062 9	0.16	29.59	1.838	0.076 3
标准差 SD	44.08	0.076	5.93	0.009 5	0.117	56.85	0.011 2	0.12	9.638	0.068	0.013 6

1) D_m : Dispersion coefficient in the mobile region; 2) ϕ : Mobile water fraction; 3) : mass transfer coefficient; 4) v : Average pore-water velocity; 5) D : Dispersion coefficient; 6) : Order of the fractional differentiation

从表 1 可以看出, CDE 和 FADE 拟合的孔隙流速的范围分别为 $0.817 \sim 1.153 \text{ cm min}^{-1}$ 和 $0.810 \sim 1.160 \text{ cm min}^{-1}$, 平均值 \bar{v} 分别为 1.02 cm min^{-1} 和 1.01 cm min^{-1} , 孔隙流速的变化是由于土壤的非均质性所致。根据 CDE 和 FADE 拟合的孔隙流速平均值, 计算得到的土柱有效孔隙率 $e (= q/\bar{v})$ ^[14] 分别为 0.234 和 0.237, 均远远小于实测得到的总孔隙率值 0.37, 这说明在过水断面孔隙中能流动的水体仅是孔隙体积的一部分, 土柱中存在一定的不动水体。

从表 1 可以看出, 100 cm 处 TRM 和 CDE 模拟的均方根误差值分别为 0.045 8 和 0.045 5, 十分接近, 从图 1a 也可以看出 TRM 和 CDE 模拟结果趋于一致, 均具有较高的模拟精度。这是因为在装填土柱时, 0~100 cm 使用的土壤相对均匀^[14], 实测的穿透曲线显示出溶质的运移为费克运移。从表 1 也可以看出, 100 cm 处 TRM 中的参数 ϕ 为 2.39×10^{-10} , 趋近于 0, 从式(2)和式(3)可以看出, 此时 TRM 就转化为 CDE。

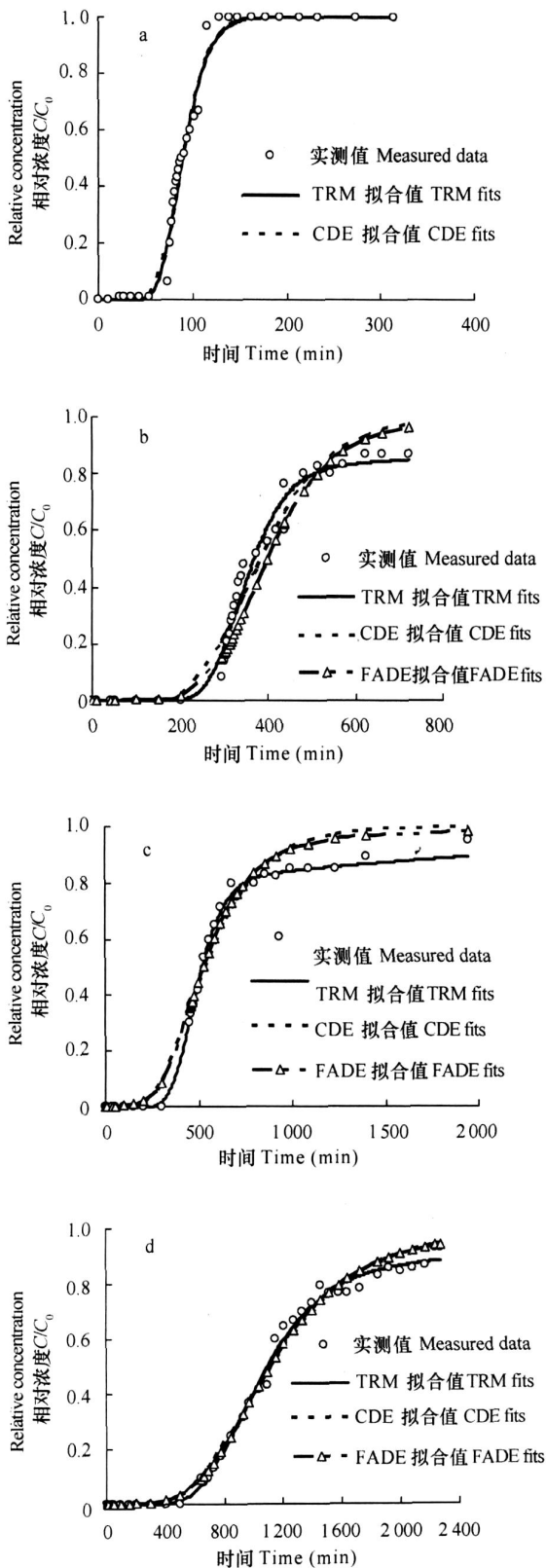


图1 长土柱中不同位置处溶质穿透曲线实测值与TRM、CDE和FADE模拟结果比较(a. $x = 100$ cm, b. $x = 400$ cm, c. $x = 600$ cm和d. $x = 1000$ cm)

Fig. 1 Comparison of measured data with the fitted BTCs of TRM, CDE and FADE at the distances of 100 cm(a), 400 cm(b), 600 cm(c), and 1 000 cm(d), respectively

在 200 ~ 700 cm 尺度范围内,从图 1b 和图 1c 中可以看出,土柱中 400 cm、600 cm 处穿透曲线的提前穿透和拖尾等不规则特征比较显著,CDE 和 FADE 的拟合结果均与实测资料间存在较大偏差,在穿透曲线尾部实测值低于 CDE 和 FADE 描述的结果,这说明在该尺度范围内溶质有很强的非费克运移特征^[18]。这是由于 200 ~ 700 cm 所装填土壤的非均质性所致,尤其是 600 ~ 700 cm,装填的土壤具有较强的非均质性^[14]。此外,从图 1b 和图 1c 中可以看出,与 CDE 和 FADE 相比,TRM 的拟合结果与实测值吻合更好,尤其在穿透曲线前端部分和尾部,模拟精度更高,较好地体现了溶质运移穿透曲线的不规则特征。

当运移距离大于 800 cm 时,从图 1d 中可以看出,在土柱中 1 000 cm 处穿透曲线的前端,CDE 和 FADE 的拟合结果与实测值吻合较好,穿透曲线的提前穿透和拖尾特征不是十分明显,这说明在非均质土柱中随着距离尺度的增加,溶质有从非费克向费克运移特征的变化趋势,这可能是由于随着尺度的增加充分的物质交换使可动和不可动区域中的溶质浓度达到平衡(费克)^[10]。从表 1 可以看出,在 800 ~ 1 200 cm,尽管 TRM 模拟的均方根误差与 CDE 和 FADE 的均方根误差相差较小,但从图 1d 可以看出,对于穿透曲线的尾部,TRM 依然能得到较好的模拟结果。模拟结果的分析表明:TRM 能更好地模拟非均质长土柱中溶质运移规律随距离尺度的变化过程,证实了 TRM 描述非均质介质中溶质在较大尺度上运移过程的可行性,并且具有较高的模拟精度。

2.2 TRM 模型参数变化特征

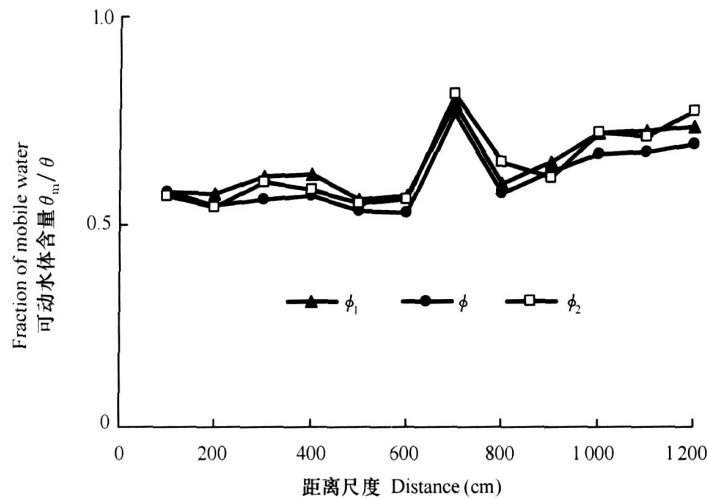
2.2.1 可动水体含量

采用 CXFIT2.1 拟合得到的 TRM 中的可动水体含量 ϕ 随距离尺度的变化过程见图 2,其变化范围为 0.526 ~ 0.767,平均值仅为 0.61,说明土柱中有近 40% 的不动水体存在。从图 2 中可以看出:随着距离的增加, ϕ 值不断变化。这是因为在非均质土柱中,装填土壤的物理特性和非均质性程度随着距离尺度在不断变化,而且有从粗质土壤到细质土壤的趋势。

根据可动水体的定义和组成,可以采用土壤的有效孔隙率 n_e 与总孔隙率 n 的比值作为 ϕ 的估计值,其中 n_e 由水流量 q 与平均孔隙流速 v 的比值来计算,即:

$$\phi = n_e / n = (q / v) / n \quad (6)$$

本研究运用两种方法确定平均孔隙流速来计算土柱中的可动水体含量。方法一^[19]:由表 1 中 CDE



注: ϕ 为拟合穿透曲线得到的可动水体含量值; ϕ_1 、 ϕ_2 为由土壤有效孔隙率与总孔隙率的比值估算得到的可动水体含量值

Note: ϕ is the fraction of mobile water by fitting with the breakthrough curves; ϕ_1 and ϕ_2 are the estimated fraction of mobile water with the ratio of effective porosity and total porosity of soil

图2 非均质土柱中可动水体含量随距离尺度的变化过程

Fig. 2 Fraction of mobile water versus distance in the heterogeneous soil column

拟合得到的各测点的平均孔隙流速 v , 运用式(6)计算 ϕ 值, 得到的 ϕ 值记为 ϕ_1 。方法二^[20]: 平均孔隙流速 v 由公式计算: $v = x / t_{0.5}$, 其中 $t_{0.5}$ 为穿透曲线上 $C / C_0 = 0.5$ 所对应的观测时间, 即为观测点浓度锋面到达时间。将 v 代入式(6)得 $\phi = qt_{0.5} / (xn)$, 得到的 ϕ 值记为 ϕ_2 。图2是由式(6)计算得到的不同距离尺度土体中的可动水体含量 ϕ_1 和 ϕ_2 与拟合得到的 ϕ 值的比较。

从图2中可以看出, ϕ_1 和 ϕ_2 与拟合穿透曲线得到的 ϕ 值基本一致, 说明采用式(6)估算 ϕ 值具有较高的精度, 这为直接确定 TRM 中的可动水体含量提供了简单方法, 但如何准确确定有效孔隙率和平均孔隙流速从而进一步提高估算精度需要进一步研究。

2.2.2 水动力弥散系数 从表1可以看出, 长土柱中 200~700 cm 处, CDE 的弥散系数介于 $14.06 \sim 168.5 \text{ cm}^2 \text{ min}^{-1}$ 之间, FADE 的弥散系数介于 $2.757 \text{ cm}^{1.661} \text{ min}^{-1} \sim 26.66 \text{ cm}^{1.696} \text{ min}^{-1}$ 之间, CDE 和 FADE 的弥散系数具有明显的随尺度增大而增大的现象, 进一步说明在该尺度范围内溶质运移具有非费克特征^[7]。TRM 的弥散系数从 100 cm 处的 $3.22 \text{ cm}^2 \text{ min}^{-1}$ 增加到 700 cm 处的 $142.89 \text{ cm}^2 \text{ min}^{-1}$, 但 TRM 的弥散系数增大的趋势要较 CDE 弱。在大于 800 cm 处, TRM、CDE 和 FADE 的弥散系数没有较明显的随距离尺度增大而增大的趋势, 但在相同尺度下, CDE 的弥散系数最大, TRM 的弥散系数其次,

而 FADE 的弥散系数最小。以上结果说明 FADE 的分数阶微分在很大程度上已经反映了弥散的尺度效应, 而 TRM 依然存在很明显的弥散尺度效应, 但 TRM 的弥散尺度效应要小于 CDE 的弥散尺度效应。弥散系数尺度效应产生的原因是由于土壤的非均质性所致, 但由于 TRM 的弥散系数仅仅反映可动区域的弥散过程, 而可动区域孔隙通道中流速分布相对于平均流速更加均匀, 而且不可动与可动区域之间扩散形式的质量交换过程也分散了一部分弥散效应, 因此相对于 CDE 的模拟, TRM 的弥散尺度效应要小一些。以上分析说明采用 TRM 模拟大尺度的溶质运移问题时, 不应将弥散系数 D_m 作为常数处理, 也必须考虑尺度效应。

2.2.3 质量交换系数 质量交换系数是表征不可动与可动区域之间溶质交换程度的参数, Haggerty 对正式发表的文献中的质量交换系数资料统计分析后发现其与对流时间 t_a 之间具有较好的相关性, 其中 t_a 为土柱长度与可动区域平均孔隙流速的比值 ($t_a = x / v_m$)^[21], 但溶质在大尺度的运移过程中是否依然存在这种相关性目前很少有研究。对于本研究的非均质实验土柱, 拟合得到的与 t_a 之间的关系见图3, 从图中看出随着 t_a 的增加而减小, 并趋于稳定值, 这可能是由于随着 t_a 的不断增大, 可动区与不可动区溶质之间的物质交换过程达到新的平衡。拟合所得到的与 t_a 存在如下关系:

$$= mt_a^{-n} = m(x/v_m)^{-n} \quad (7)$$

式中, m, n 为经验参数, 反映土壤特性的影响。通过拟合得到 $m = 0.07645, n = 1.1472$, 拟合决定系数 $R^2 = 0.7838$, 拟合结果见图 3。从图 3 可以看出, 对于溶质在非均质长土柱的运移过程中, 与 t_a 之间依然存在较好的相关性, 而且这种相关性可以用幂函数来表达。与 t_a 之间的相关性说明, 不同时间尺度的 t_a 会导致不同的 α , 说明 α 是具有时间尺度的, 即两区溶质的交换过程具有多重时间尺度, 因此, 即使是对于均质土壤, 当应用一个对流时间尺度的实验所得到的质量交换系数去预测另一对流时间尺度的溶质运移过程时也可能存在误差。同时, 单一 α 的质量交换方程可能难以描述两区溶质间这种复杂的多时间尺度交换过程, 因此不应将 α 作为常量处理, 应该采用一系列具有不同 α 的质量交换方程来描述不同时间尺度的交换过程, 模拟精度会更高。

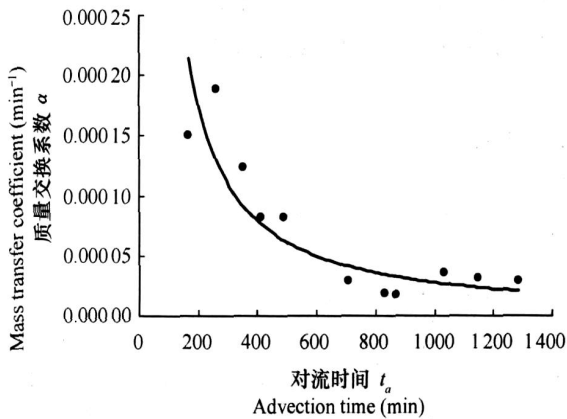


图 3 TRM 中质量交换系数与对流时间的关系

Fig. 3 Relationship between mass transfer coefficient of TRM and advection time

3 结 论

运用 TRM 对 1250 cm 长的一维非均质土柱中 NaCl 的运移过程进行模拟研究, 同时与 CDE 和 FADE 的模拟结果进行比较分析, 结果表明: TRM 模拟值与实测值具有较好的一致性, 与 CDE 和 FADE 相比, TRM 能更好地描述穿透曲线的提前穿透和拖尾特征, 说明 TRM 可以有效地模拟非均质土壤中溶质在较大尺度上的运移过程。但 TRM 模拟长土柱中的溶质运移过程时, 依然存在弥散系数的尺度效应, 而且质量交换系数与对流时间尺度之间存在幂函数的相关关系, 因此在模拟大尺度的溶质运移过程时不应将弥散系数和质量交换系数作为常量处

理。TRM 中的可动水体含量可以由土壤的有效孔隙率与总孔隙率的比值来确定, 且与土壤的非均质性程度密切相关。

TRM 较好地描述了溶质运移的提前穿透和拖尾现象, 而 FADE 则较好地解决了溶质运移的尺度效应问题, 因此在 TRM 基础上考虑溶质弥散通量与浓度梯度的分数阶微分来模拟非均质土壤中溶质在大尺度上的运移过程是进一步的研究方向。

致 谢 本文非均质长土柱实验资料由中山大学张仁铎教授提供, 在此致谢。

参 考 文 献

- [1] 李韵珠, 李保国, 编著. 土壤溶质运移. 北京: 科学出版社, 1998. Li Y Z, Li B G. eds. Solute Transport in Soil (In Chinese). Beijing: Science Press, 1998
- [2] 王丽, 王金生, 杨志峰, 等. 不流动水对包气带溶质运移的影响研究进展. 水利学报, 2001(12): 68~73. Wang L, Wang J S, Yang Z F, et al. A review of study on effect of immobile water on solute transport in unsaturated zone (In Chinese). Journal of Hydraulic Engineering, 2001(12): 68~73
- [3] 王金生, 杨志峰, 王丽, 等. 溶质在细粒孔隙介质中迁移预测的可靠性分析. 水利学报, 2001(9): 16~21. Wang J S, Yang Z F, Wang L, et al. Safety analysis of solute transport prediction in clay (In Chinese). Journal of Hydraulic Engineering, 2001(9): 16~21
- [4] 马东豪, 王全九. 土壤溶质迁移的两区模型与两流区模型对比分析. 水利学报, 2004(6): 92~97. Mang D H, Wang Q J. Analysis of two-region model and two-flow domain model for soil solute transport (In Chinese). Journal of Hydraulic Engineering, 2004(6): 92~97
- [5] Pachepsky Y, David B, Walter R. Simulating scale-dependent contaminant transport in soils with the fractional advection-dispersive equation. Soil Sci. Soc. Am. J., 2000, 64(4): 1234~1243
- [6] Zhou L, Selim H M. Application of the fractional advection-dispersion equation in porous media. Soil Sci. Soc. Am. J., 2003, 67(4): 1079~1084
- [7] Huang G, Huang Q, Zhan H. Evidence of one-dimensional scale-dependent fractional advection dispersion. J. Contam. Hydrol., 2006, 85: 53~71
- [8] Berkowitz B, Klafter J, Metzler R. Physical pictures of transport in heterogeneous media: Advection-dispersion, random walk, and fractional derivative formulations. Water Resour. Res., 2002, 38(10), 1191, doi:10.1029/2001WR001030
- [9] Lu S, Molz F J, Fix G J. Possible problems of scale dependency in applications of the three-dimensional fractional advection-dispersion equation to natural porous media. Water Resour. Res., 2002, 38(9), 1165, doi:10.1029/2001WR000624
- [10] Padilla I Y, Yeh T C J, Conklin M H. The effect of water content on solute transport in unsaturated porous media. Water Resour. Res., 1999, 35(11): 3303~3313

- [11] Bond W J, Wierenga P J. Immobile water during solute transport in unsaturated sand columns. *Water Resour. Res.*, 1990, 26(10): 2 475 ~ 2 481
- [12] Li L, Barry D A, Culligan-Hensley P J, *et al.* Mass transfer in soils with local stratification of hydraulic conductivity. *Water Resour. Res.*, 1994, 30(11): 2 891 ~ 2 900
- [13] Snow V O. In situ measurement of solute transport coefficients: Assumptions and errors. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 1999, 63(2): 255 ~ 263
- [14] Huang K, Toride N, van Genuchten M Th. Experimental investigation of solute transport in large homogeneous and heterogeneous soil columns. *Transport in Porous Media*, 1995, 18: 283 ~ 302
- [15] van Genuchten M Th, Wierenga P J. Mass transfer studies in sorbing porous media I. Analytical solutions. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 1976, 40(4): 473 ~ 480
- [16] Huang G H, Huang Q Z, Zhan H B. Modeling contaminant transport in homogeneous porous media with fractional advection-dispersion. *Science in China, Ser. D Earth Sciences*, 2005, 48(Suppl.): 249 ~ 254
- [17] Toride N, Leij F J, van Genuchten M T. The CXTFIT code for estimating transport parameters from laboratory or field tracer experiments. *In: Toride N. ed. Version 2.1. U. S. Salinity Laboratory, Research Report No. 137. CA: Riverside*, 1999
- [18] Berkowitz B, Scher H, Silliman S E. Anomalous transport in laboratory-scale, heterogeneous porous media. *Water Resour. Res.*, 2000, 36(1): 149 ~ 158
- [19] Veeh R H, Inskip W P, Roe F L, *et al.* Transport of Chlorsulfuron through soil columns. *J. Environ. Qual.*, 1994, 23: 542 ~ 549
- [20] 史海滨, 陈亚新. 吸附作用与不动水体对土壤溶质运移影响的模拟研究. *土壤学报*, 1996, 33(3): 258 ~ 267. Shi H B, Chen Y X. Study on influences of soil adsorption and immobile water on solute transport in soil by numerical simulation (In Chinese). *Acta Pedologica Sinica*, 1996, 33(3): 258 ~ 267
- [21] Haggerty R, Harvey C F, von Schwerin C F, *et al.* What controls the apparent timescale of solute mass transfer in aquifers and soils? A comparison of experimental results. *Water Resour. Res.*, 2004, 40, W01510, doi:10.1029/2002WR001716

SIMULATION OF SOLUTE TRANSPORT AT LARGE SCALE IN SATURATED HETEROGENEOUS SOIL WITH TWO-REGION MODEL

Gao Guangyao¹ Feng Shaoyuan^{1†} Huang Guanhua^{1,2}

(1 College of Hydraulic and Civil Engineering, China Agricultural University, Beijing 100083, China)

(2 Chinese-Israeli International Center for Research and Training in Agriculture, Beijing 100083, China)

Abstract At present, most of studies about the two-region model (TRM) are all focused on modeling solute transport in laboratory short soil column at small scale. The objective of this study was to investigate the validity and parameters of the two-region model (TRM) describing solute transport across a long range of travel distances in heterogeneous soil. We used the TRM, the convection-dispersion equation (CDE) and the fractional advection-dispersion equation (FADE) to characterize the solute transport process in a 1 250-cm long one-dimensional heterogeneous soil column. Comparing to CDE and FADE, the breakthrough curves (BTCs) at different travel distances can be better fitted by using TRM, and TRM is better to capture the full evolution of the BTCs, especially for the early and long tailing part. It implies that TRM is a highly effective approach to describe the evolution of solute transport at relatively large-scale domain in heterogeneous soil. We found that TRM had similar scale-dependent dispersion as CDE. However, the dispersion coefficient of TRM was less scale-dependent than that of CDE. It was also found that the mass transfer coefficient of TRM decreased with the advection time in a power law function indicating the presence of multiple timescales of solute mass transfer between immobile and mobile regions, and the mobile water fraction of TRM can be determined with the ratio of effective porosity and total porosity of soil.

Key words Solute transport; Heterogeneous soil; Two-region model; Large scale; Immobile water; Numerical simulation