

不同质地土壤中镉运移的数值模拟与预测*

林 青¹ 徐绍辉^{1†} 王凯丽²

(1 青岛大学环境科学系, 山东青岛 266071)

(2 河南省环境保护科学研究院, 郑州 450004)

摘 要 通过室内土柱实验, 采用溶质运移的对流-弥散方程, 模拟了饱和条件下重金属镉在不同质地土壤中的运移。结果表明, 化学非平衡单点模型 (One-site model, OSM) 能较好地模拟镉在粉壤土、壤砂土中的运移 (R^2 分别为 0.810 和 0.901), 而对镉在砂壤土中运移的模拟效果较差 ($R^2 = 0.542$)。OSM 模型准确地模拟了土柱中镉运移的穿透时间, 但是对穿透曲线拖尾部分的拟合效果欠佳。土壤对镉运移的阻滞作用与土壤理化性质有关, 但是其机理还需要进一步研究。由于上层砂壤土对镉的强烈吸附, 使镉的穿透时间较晚 (10 pv), 且不同土层界面处镉的浓度和吸附量变化明显。

关键词 化学非平衡单点模型; 溶质运移; 穿透曲线; 阻滞作用; 层状分布土壤

中图分类号 S152.7 **文献标识码** A

污水灌溉是缓解农业水资源紧缺的有效措施之一, 在世界各地得到了广泛的推广^[1-3], 污水中含有大量的养分, 通常可取得较好地增产效果, 同时, 也将很多污染物带入农田, 引发一系列的农业环境与生态问题^[4-5]。重金属是污水中的主要污染物, 虽然经过二级处理仍然难以去除。位于沈阳市西郊张士灌区是发现最早、面积较大、污染严重的镉污染区。进入土壤的重金属由于其毒性大、难降解, 被作物吸收后随食物链进入人体, 严重危害人类健康^[6]。通常认为重金属容易被土壤介质吸附而滞留在土壤表层, 但近年来, 越来越多的田间实验和实验室土柱模拟实验研究发现, 重金属在土壤剖面可发生数十厘米的运移且土壤深处可检测到明显的重金属含量^[7-8]。影响重金属运移的因素包括很多方面, 如重金属的属性、土壤的理化性质及气象条件等, Guisquiani 等研究发现可溶性有机碳 (DOC) 可通过与重金属离子竞争吸附点位和与重金属离子形成可溶性络合物两种作用方式来增强其在土壤中的运移^[9]。土壤中的重金属还会经由雨水淋滤作用进入地下水系统, 对饮用水安全构成威胁。

常用的描述溶质在土壤中运移的模型主要有两大类, 即确定性模型和随机模型。确定性模型, 即对流-弥散方程 (Convection-dispersion equation, CDE),

该模型可以较好地揭示溶质在均匀多孔介质中的运移机理及时间、空间对溶质运移的影响, 具有坚实的物理基础。随机模型将溶质在土壤中的运移过程作为一个随机过程来处理, 其一是在确定性模型中引入随机参数^[10-11]; 其二是完全随机模型, 也就是说当制约溶质运移的机理不清楚时, 在某一时刻从给定土壤容积输出的溶质质量速率可看作是前一时刻输入的随机函数^[12]。在重金属运移方面, 孙军娜和徐绍辉运用 CDE 模型对镉在石英砂中的运移情况进行了数值模拟^[13]。冯绍元等采用 CDE 模型较好地模拟了排水条件下镉在土壤中的运移过程^[14]。Mathialagan 和 Viraraghavan 运用 Thomas 函数方法模拟了重金属镉在珍珠岩内的吸附、解吸和运移过程^[15]。

目前, 对重金属在土壤中运移的研究多集中在均质土壤中, 而实际上, 重金属沿土壤剖面向下运移的过程中, 随着运移深度的增加, 土壤质地会发生一定的变化, 不同质地的土壤会对重金属产生不一样的阻滞能力。分析重金属在层状分布土壤中的运移行为及准确地模拟该过程, 对土壤重金属污染的研究具有更重要的现实意义。本文采用动态土柱置换方法研究了镉在沈阳细河边农田剖面三种不同质地土壤中的运移, 通过数值模拟获得不同质地土壤中镉运移参数, 并模拟了镉在这三种不同

* 国家自然科学基金项目 (40771095, 41171183) 资助

† 通讯作者, E-mail: shhxu@qdu.edu.cn

作者简介: 林 青 (1981—), 女, 山东人, 博士, 主要从事土壤水流和溶质运移方面研究。E-mail: qdulinqing@163.com

收稿日期: 2012-11-29; 收到修改稿日期: 2013-01-14

质地土壤组成的层状分布土壤剖面中的运移。

1 材料与方法

1.1 供试材料

土样取自沈阳细河边闲置水稻田,去除土壤

表层 0 ~ 10 cm,按土壤质地不同将剖面上土壤分为 3 层,第一层 10 ~ 35 cm,第二层 35 ~ 60 cm,第三层 60 ~ 85 cm。按国际制将土壤质地依次定名为:砂质壤土、粉壤土、壤质砂土。用常规分析方法测定土壤的理化性质(表 1)。土样自然风干后,过 2 mm 塑料筛,备用。

表 1 供试土壤理化性质

Table 1 Physical and chemical properties of tested soils

采样深度 Depth (cm)	土壤质地 Soil texture	pH (1:2.5 H ₂ O)	容重		含水量		有机质		Eh (mV)	粒径分布 (%)		
			Bulk density (g cm ⁻³)	Water content (cm ³ cm ⁻³)	Organic matter (g kg ⁻¹)	Particle size distribution						
10 ~ 35	砂壤 Sandy loam	6.33	1.54	0.194	16.55	39.0	4.55	36.68	58.77	< 2 μm	2 ~ 50 μm	> 50 μm
35 ~ 60	粉壤 Silty loam	6.30	1.52	0.133	5.69	43.6	4.93	49.98	45.09			
60 ~ 85	壤砂 Loamy sand	5.84	1.43	0.072	3.28	70.3	1.19	10.12	88.69			

1.2 实验方法

运移实验是在室内一维饱和土柱中进行的,土柱高 10 cm,内径 5 cm,由有机玻璃加工而成。每个土柱上下两端各填加 1 cm 的石英砂,以保证供液能均匀的通过柱中的土壤,同时在土柱的两端接口处各加入一定的脱脂棉,防止石英砂颗粒堵塞进出水孔。分 4 次用过 2 mm 筛的土样装填土柱。

1.2.1 示踪实验 为了获得溶质运移的水力学参数,首先进行了示踪实验,选用非反应性 Br 作为示踪物质。实验时,先打开蠕动泵以较慢的流速自下而上输入 0.01 mol L⁻¹ 的 NaNO₃ 背景溶液饱和土柱以排净柱内的空气,然后调整入流方向,使其从上向下流经土柱,待稳定流场形成后,脉冲输入 50 ml 左右的 pH 为 4 的 KBr(0.05 mol L⁻¹) 溶液,之后用 NaNO₃ 溶液连续洗脱,土柱出流液用自动部分收集器定时采集,用 Br 离子选择电极测定出流液中 Br 浓度。

1.2.2 镉运移实验 实验时,先打开蠕动泵以较慢的流速自下而上输入 0.01 mol L⁻¹ 的 NaNO₃ 溶液饱和土柱,然后调整入流方向,使其从上向下流经土柱,待稳定流场形成后,采用脉冲方式输入大约 1 000 ml 的 pH 为 4 浓度为 500 mg L⁻¹ 的硝酸镉溶液,随后用 NaNO₃ 溶液连续洗脱,土柱出流液用自动部分收集器定时采集,用原子吸收光谱仪测定出流液中镉的浓度。

1.2.3 层状分布土壤剖面中镉的运移 土壤为层状分布,土壤质地随深度的变化情况为:砂壤土、粉壤土、壤砂土,根据实际情况取每个土层厚度 25 cm,则整个土壤剖面深度为 75 cm,模拟饱和条件下镉

在层状分布土壤中的运移情况。镉的输入方式设为脉冲输入,输入量为 1 000 ml, pH 为 4,浓度为 500 mg L⁻¹。

2 溶质运移模型

由于本文研究的是饱和稳定流条件下,溶质在均匀土柱中的运移,故采用了 CDE 模型对实验结果进行模拟分析。

2.1 控制方程

根据实验结果,运移过程中包含了水动力弥散和化学非平衡吸附过程^[16],方程如下:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\rho}{\theta_s} \frac{\partial s^e}{\partial t} + \frac{\rho}{\theta_s} \frac{\partial s^k}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v \frac{\partial c}{\partial x} \quad (1)$$

式中, c 为液相中溶质的浓度(mg L⁻¹), s^e , s^k 分别为平衡与非平衡吸附时单位质量土壤所吸附的溶质质量(mg g⁻¹), D 为水动力弥散系数(cm² h⁻¹), $D = \lambda v$, λ 为弥散度(cm), v 为平均孔隙水流速(cm h⁻¹), ρ 为容重(g cm⁻³), θ_s 为饱和含水量(cm³ cm⁻³), x 为距离(cm), t 为时间(h)。

采用 Freundlich 等温吸附方程来描述溶质的吸附^[17],则:

$$\frac{\partial s^e}{\partial t} = f k_f \beta c^{\beta-1} \frac{\partial c}{\partial t} \quad (2)$$

$$\frac{\partial s^k}{\partial t} = \alpha_k \left[(1-f) k_f c^\beta - s^k \right] \quad (3)$$

式中, f 为吸附平衡时发生瞬时吸附的交换点位所占的分数(-), α_k 为一阶动力学速率系数(h⁻¹), k_f (cm³ g⁻¹), β (-) 为吸附平衡的经验系数。

2.2 定解条件

实验开始后以脉冲的方式加入示踪剂和镉溶液,此时,模型的上边界条件为溶质通量边界,为一常数;随后是一个用去离子水连续洗脱的过程,此时,上边界为零通量边界。在整个模拟过程中,模拟区域的下边界定在溶质的出流端,边界条件为零浓度梯度。上述定解条件的数学表达式为:

$$\begin{cases} c(x, 0) = 0 & -L \leq x \leq 0, \quad t = 0 \\ \theta_s \left(-D \frac{\partial c}{\partial x} + vc \right) = q(0, t) c_0(0, t) & x = 0, \quad t > 0 \\ \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_{x=-L} = 0 & L = 8 \text{ 或 } 75 \text{ cm}, \quad t > 0 \end{cases} \quad (4)$$

式中, $q(0, t)$ 为加入土柱中的水通量 (cm h^{-1}), 对于脉冲阶段, $c_0(0, t)$ 分别为示踪剂 (mol L^{-1}) 和镉 (mg L^{-1}) 的浓度, 对于洗脱阶段, $c_0(0, t)$ 取值为 0。

对于层状分布土壤中镉迁移的模拟, 为了保证不同土层交界处浓度变化的连续性, 交界处的边界条件定义为:

$$\begin{cases} c_1(x, t) = c_2(x, t) & x = -25 \text{ cm}, \quad t > 0 \\ c_2(x, t) = c_3(x, t) & x = -50 \text{ cm}, \quad t > 0 \end{cases} \quad (5)$$

c_1 、 c_2 、 c_3 分别表示第一、二、三层土壤中液相镉的浓度。

以上方程采用 HYDRUS-1D 求解^[16], 通过对 Br 穿透曲线 (Breakthrough curves, BTCs) 的拟合获得水力学参数 θ_s 和 λ , 然后将其带入耦合 Freundlich 等温吸附反应的溶质运移模型, 反演求得镉迁移的吸附特性参数 f 、 k_F 、 β 、 α_k 。最后, 运用上述所求得的参数模拟预测镉在层状分布土壤中的运移情况。

3 结果与讨论

3.1 示踪剂运移模拟

饱和条件下溶质在土壤中运移受饱和含水量 θ_s 的影响较大, 故通过对非反应性溶质 Br 在土柱中运移穿透曲线的数值拟合, 得到饱和含水量 θ_s , 同时求得纵向弥散度 λ 。根据三种质地土壤的实验结果, 如图 1, 这里用相对浓度 (c/c_0 , c_0 为加入的溶质浓度) 和孔隙体积 (Pore volume, pv) 来描述 Br 的出流浓度随时间的变化, 采用平衡 CDE 模型对 Br 的穿透曲线进行拟合。模型所涉及的参数如表 2 所示, q 为实测的饱和水流量, θ_s 、 α 、 n 则采用土壤传递函数模型 (Pedotransfer Function) 分别生成砂壤、粉壤、

壤砂三种土壤类型的 van Genuchten 水力学参数, l 取 0.5。由于采用平衡 CDE 模型, 故 f 取为 1, 而 Br 为非反应性溶质, k_F 、 β 和 α_k 均为 0。

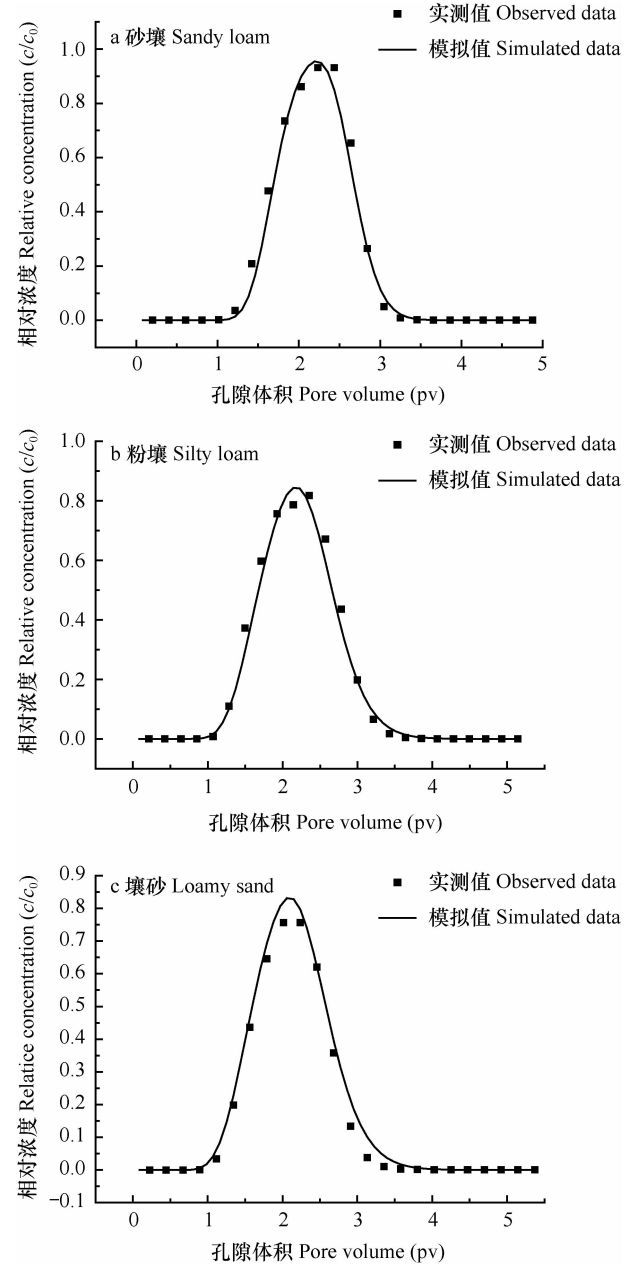


图 1 不同质地土壤中 Br 运移的实测值与模拟值

Fig. 1 Observed and simulated Br transport in soils different in texture

从图 1 中可以看出, 模型拟合得到的 BTCs 与实测值之间的吻合度很好 ($R^2 \geq 0.99$, $\text{RMSE} \leq 0.038$), 具有良好的对称性, 且无拖尾现象, 因此, 推测在实验所设的流速下, 土壤中没有物理非平衡现象发生, 即可以忽略非可动水对 Br 运移的影响。反演得到的参数 θ_s 和 λ 将用于镉运移的模拟及预测。

表 2 输入模型的参数和由 Br 的 BTCs 拟合得到的参数

Table 2 Input parameters of the model and parameters derived from BTCs of Br

质地 Texture	θ_r (cm ³ cm ⁻³)	θ_s (cm ³ cm ⁻³)	α (cm ⁻¹)	n	l	q (cm h ⁻¹)	λ (cm)	R^2	RMSE
砂壤 Sandy loam	0.065	0.462 ± 0.003	0.075	1.89	0.5	2.195	0.108 ± 0.013	0.990	0.038
粉壤 Silty loam	0.067	0.439 ± 0.004	0.02	1.41	0.5	2.183	0.227 ± 0.020	0.990	0.032
壤砂 Loamy sand	0.057	0.402 ± 0.003	0.124	2.28	0.5	2.189	0.269 ± 0.022	0.995	0.030

3.2 镉运移模拟

由实验结果可知,重金属镉的穿透曲线表现出不对称性,镉出流浓度急剧上升后缓慢下降,说明存在化学非平衡吸附反应(Rate-limited sorption)^[18],采用耦合 Freundlich 吸附的化学非平衡单

点模型(OSM)对镉在三种质地土壤中的运移进行模拟^[19], $f=0$,即土壤对镉的吸附完全为动态反应。模型所涉及的参数见表3,其中, θ_s 和 λ 由Br示踪实验获得, q 由镉出流实验测得,水力学参数 θ_r 、 α 、 n 、 l 与示踪实验相同,表中未给出。

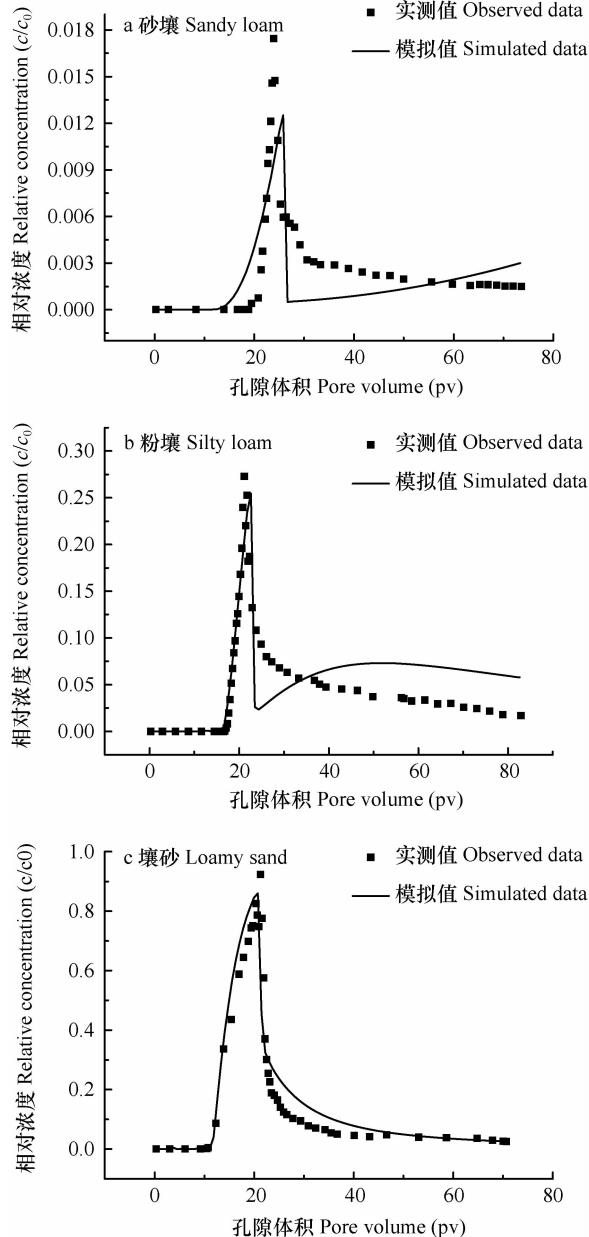


图 2 不同质地土壤中镉运移的实测值与模拟值

g. 2 Observed and simulated Cd transport in soils different in texture

表 3 输入模型的参数和由镉的 BTCs 拟合得到的参数

Table 3 Input parameters of the model and parameters derived from BTCs of Cd

质地 Texture	θ_s (cm ³ cm ⁻³)	q (cm h ⁻¹)	λ (cm)	f	k_F (cm ³ g ⁻¹)	β	α_k (h ⁻¹)	R^2	RMSE
砂壤 Sandy loam	0.462	2.308	0.108	0	35.653 ± 4.344	0.522 ± 0.024	0.013 ± 0.002	0.542	0.003
粉壤 Silty loam	0.439	2.226	0.227	0	6.538 ± 0.113	0.171 ± 0.033	0.078 ± 0.008	0.810	0.033
壤砂 Loamy sand	0.402	1.789	0.269	0	2.069 ± 0.157	0.069 ± 0.005	0.202 ± 0.015	0.901	0.047

从图 2 中可以看出,OSM 模型对镉在粉壤土和壤砂土中运移的拟合效果较好,确定性系数较高(R^2 分别为 0.810,0.901),对镉在砂壤土中运移的拟合效果较差($R^2=0.542$),结合以往的研究,作者认为这主要是因为表层砂壤土人为扰动厉害,土壤组分复杂,化学反应种类繁多,而模型本身没有考虑不同化学反应对镉运移的影响。再者是因为砂壤土对镉的阻滞作用较强,镉的出流浓度很小,从而突出了优势流等一些其他因素对镉运移的影响,使模拟效果较差。OSM 模型较准确地模拟了土柱中镉的穿透时间,但对穿透曲线拖尾部分的模拟效果不好,这可能是由于土壤对镉的吸附不能用一阶动力学速率系数来描述,或者是存在多种动力学吸附反应。Selim 和 Iskandar 研究发现在 Cu^{2+} 浓度较高时,土壤对 Cu^{2+} 的吸附存在滞后反应,故不能用一阶动力学速率系数来描述^[20]。此外,拖尾部分的反应可能是由溶质质量传递扩散作用(mass transfer diffusion)控制,而 OSM 模型中没有包含这部分反应^[21]。

拟合得到的吸附特性参数 k_F (砂壤) > k_F (粉壤) > k_F (壤砂),说明表层砂壤土对镉的阻滞能力最大,与实验结果相符。这主要是因为土壤对重金属的吸附与土壤的 pH、有机质含量、阳离子交换量等理化性质有关,pH 越高、有机质含量越大越不利于重金属的出流^[22-23],砂壤土的 pH 和有机质含量均较高。此外,砂壤土黏粒含量较高,土壤颗粒的比表面积较大,能提供更多的可供吸附的点位^[24],从而不利于镉的运移。三种土壤的 β 值均较小,表明土壤表面的不均匀性较强,存在多种吸附点位^[25]。模拟得到的 α_k 大小顺序为: α_k (砂壤) < α_k (粉壤) < α_k (壤砂), α_k 越大,表明柱内反应达到平衡的时间越快,穿透曲线形状越趋向于平衡运移。

3.3 模拟预测

运用上述模型拟合得到的参数,模拟镉在饱和层状分布土壤剖面中的运移,其中土壤质地分布及深度与采样点实际情况相同(自上而下为砂壤、粉壤、壤砂)。模拟中发现直接将吸附特性参数 k_F 、 β

带入模型中运行,计算不收敛。根据 van Genuchten 的线性化方法:

$$K = \frac{2}{\beta + 1} k_F c_0^{\beta-1} \quad (6)$$

由模拟得到的 k_F 和 β 求得线性分配系数 K 。土壤剖面不同深度处的 K 值为:0 ~ 25 cm:46.85 cm³ g⁻¹, 25 ~ 50 cm:11.17 cm³ g⁻¹, 50 ~ 75 cm:3.87 cm³ g⁻¹。 q 取实验的平均值 2 cm h⁻¹,采用 OSM 模型对土壤不同深度处(25 cm、50 cm、75 cm)镉的出流动态进行模拟。

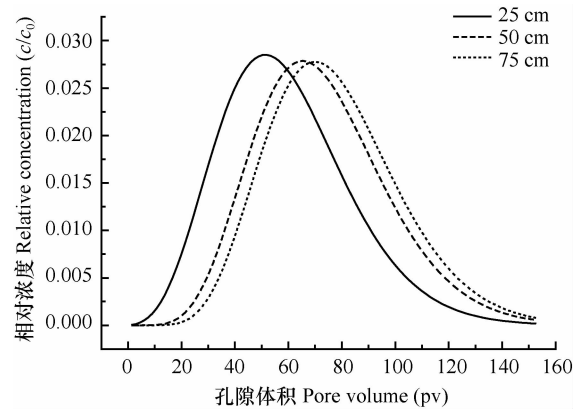


图 3 土壤剖面不同深度处镉的浓度随时间的变化情况
Fig. 3 Temporal variation of Cd concentrations in soil layers different in depth in soil profile

从图 3 中可以看出,模拟得到的穿透曲线较反演结果平滑且对称性好,可能是因为镉在土壤中的停留时间较长,从而延长了镉的反应时间,使吸附反应更趋向于平衡,再者是用线性吸附替代了 Freundlich 吸附。穿透曲线并没有揭示层状分布土壤的非均质性,这是因为每层土壤为均质分布而溶质必须穿过每层土壤才能到达出流端。由于上层砂壤土对镉的阻滞能力较强,造成下层粉壤土和壤砂土的出流时间较晚(约 10 pv),底层壤砂土的阻滞能力较中层粉壤土相差不大,故出流时间稍有延迟。不同深度处穿透曲线的峰值浓度基本相同,主要是因为粉壤土和壤砂土的阻滞能力远小于上层砂壤土且相差不大。

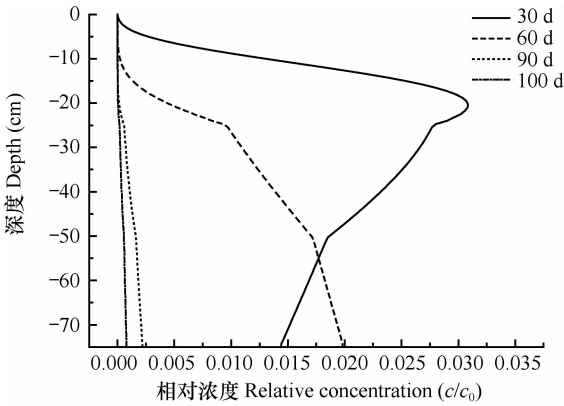


图4 不同时刻镉的浓度沿土壤剖面的分布

Fig. 4 Temporal variation distribution of Cd concentration in soil profile

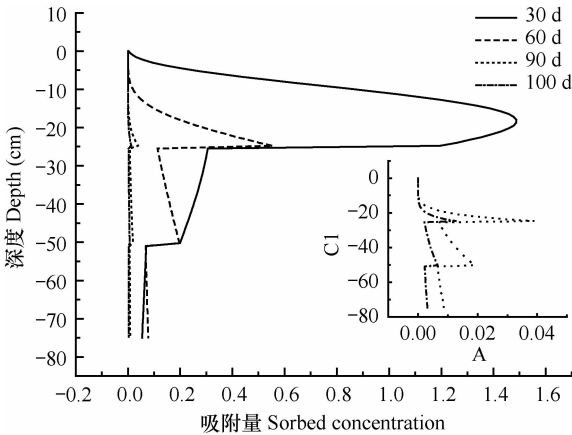


图5 不同时刻镉的吸附量沿土壤剖面的分布

Fig. 5 Temporal variation of distribution of Cd concentration in soil profile

如图4和图5所示,不同时刻镉沿土壤剖面的分布深刻地反映了层状分布土壤的非均质性。由于不同土层界面处土壤质地变化明显,故无论液相镉的浓度还是土壤对镉的吸附量在界面处发生突变,而实际土壤不同土层的质地变化是一个渐变的过程,不存在明显的界面,镉浓度及吸附量变化平缓。从图中可以看出,60 d时底层壤砂土对镉的吸附量及液相镉的浓度均大于30 d时的预测数据,这主要是因为淋洗阶段大量的镉从上层土壤解吸出来,造成底层土壤镉的浓度增加,吸附量也增大。淋洗到100 d时,土壤剖面中镉的浓度及吸附量都趋近于0,这与实际情况不符,主要是因为土壤对镉吸附中存在一小部分不可逆反应,这部分镉在淋洗过程中是不能被解吸的,而模型本身认为吸附反应都是可逆的。

模拟结果表明镉向下运移的速度较慢,而自然界中多为非饱和情况,其更不利于镉的运移,镉要

经过几年,甚至十几年的时间才能到达土壤深部,进而污染地下水,潜在危害非常大。但是在外界环境条件改变时,如酸雨,会加大重金属向下运移的危险^[26]。

4 结 论

利用室内填充土柱模拟研究了同一剖面上不同质地土壤(砂壤、粉壤、壤砂)对镉运移的阻滞作用。耦合 Freundlich 吸附的 OSM 模型能较好地模拟镉在粉壤($R^2 = 0.810$)和壤砂中($R^2 = 0.901$)的运移,对镉在砂壤中($R^2 = 0.542$)运移的模拟效果较差。OSM 模型较准确地模拟了镉的穿透时间,但对穿透曲线拖尾部分的模拟效果不好,可能是因为土壤对镉的吸附不能用一阶动力学速率系数来描述,或者是存在多种动力学吸附反应。三种质地土壤对镉运移阻滞能力大小为:砂壤 > 粉壤 > 壤砂。运用 OSM 模型拟合得到的参数模拟镉在层状分布土壤剖面中的运移的结果表明,穿透曲线较反演平滑且对称性好,没有揭示出层状分布土壤的非均质性。上层砂壤土对镉运移的阻滞能力较强,使下层粉壤土和壤砂土的出流时间较晚,镉向下运移的速度较慢;不同土层界面处镉的浓度和吸附量变化明显。由于模型没有考虑土壤对镉的不可逆吸附反应,模拟后期(100 d)层状分布土壤剖面中镉的浓度和吸附量均趋向于零。

文中在模拟镉在层状分布土壤剖面中运移时,发现将拟合得到的非线性吸附特性参数 k_F 、 β 带入模型中运算,模型不收敛,而将线性化后得到的吸附分配参数 K 带入模型,模拟收敛,目前对其原因尚不能给出合理的解释,需要做进一步的研究。

参 考 文 献

- [1] Angelakis A N, Bontoux L. Wastewater reclamation and reuse in European countries. *Water Policy*, 2001, 3: 47—59
- [2] 刘韬,郭淑满. 污水灌溉对沈阳市农田土壤中重金属含量的影响. *环境保护科学*, 2003, 29(3): 51—52. Liu T, Guo S M. Effect of wastewater irrigation on heavy metal content in farm soil in Shenyang (In Chinese). *Environmental Protection Science*, 2003, 29(3): 51—52
- [3] 王凯荣,张玉焯. 25年引灌含 Cd 污水对酸性农田土壤的污染及其危害评价. *农业环境科学学报*, 2007, 26(2): 658—661. Wang K R, Zhang Y Z. Investigation and evaluation on Cd pollution of the acidic farmland soils irrigated with Cd-polluted wastewater for 25 years (In Chinese). *Journal of Agro-Environment Science*, 2007, 26(2): 658—661

- [4] 齐志明,冯绍元,黄冠华,等. 清、污水灌溉对夏玉米生长发育影响的田间试验研究. 灌溉排水学报,2003, 22(2): 36—38. Qi Z M, Feng S Y, Huang G H, et al. Experimental study on effects of irrigation water quality on plant growth of summer corn (In Chinese). Journal of Irrigation and Drainage, 2003, 22(2): 36—38
- [5] 孙瑞波,盛下放,李娅,等. 南京栖霞重金属污染区植物富集重金属效应及其根际微生物特性分析. 土壤学报,2011, 48(5): 1013—1020. Sun R B, Sheng X F, Li Y, et al. Phyto-accumulation of heavy metals and characteristics of rhizosphere microbes in heavy metal contaminated soils Qixia, Nanjing (In Chinese). Acta Pedologica Sinica, 2011, 48(5): 1013—1020
- [6] 钟道旭,韩存亮,蒋金平,等. 镀锌厂周围农田土壤-水稻中重金属污染及其风险. 土壤,2011, 43(1): 143—147. Zhong D X, Han C L, Jiang J P, et al. Heavy metal contamination in soil-rice grain and its risk assessment around a galvanizing plant. Soils, 2011, 43(1): 143—147
- [7] Marta S Z, Emiliano B, Raúl S L, et al. Heavy metal mobility in polluted soils: Effect of different treatments. American Journal of Environmental Sciences, 2008, 4(6): 620—624
- [8] Garcia G, Peñas J M, Manteca J I. Zn mobility and geochemistry in surface sulfide mining soils from SE Spain. Environmental Research, 2008, 106: 333—339
- [9] Guisquiani P L, Concezzi L, Businelli M, et al. Fate of pig sludges liquid fraction in calcareous soil: Agricultural environmental implications. Journal of Environmental Quality, 1998, 27: 364—371
- [10] Amoozgar-Fard A, Nielsen D R, Warrick A W. Soil solute concentration distributions for spatially varying pore water velocities and apparent diffusion coefficients. Soil Science Society of America Journal, 1982, 46: 3—8
- [11] 杨金忠,蔡树英,黄冠华,等. 多孔介质中水分及溶质运移的随机理论. 北京: 科学出版社,2000. Yang J Z, Cai S Y, Huang G H, et al. Radom theory of water and solute transport in porous media (In Chinese). Beijing: Science Press, 2000
- [12] Jury W A. Simulation of solute transport using a transfer function model. Water Resource Research, 1982, 18(2): 363—368
- [13] 孙军娜,徐绍辉. Cu/Pb/Zn/Cd 在石英砂中的迁移实验及模拟. 土壤学报,2010, 47(6): 1101—1109. Sun J N, Xu S H. Modeling Cu/Pb/Zn/Cd transport in quartz sand column (In Chinese). Acta Pedologica Sinica, 2010, 47(6): 1101—1109
- [14] 冯绍元,齐志明,王亚平. 排水条件下饱和土壤中镉运移实验及其数值模拟. 水利学报,2004, 10: 89—94. Feng S Y, Qi Z M, Wang Y P. Experimental and numerical simulation of Cadmium transport in saturated soil under the condition of drainage (In Chinese). Journal of Hydraulic Engineering, 2004, 10: 89—94
- [15] Mathialagan T, Viraraghavan T. Adsorption of Cadmium from aqueous solutions by perlite. Journal of Hazardous Materials, 2002, 94: 291—303
- [16] Šimůnek J, van Genuchten M Th, Šejna M. The HYDRUS—1D software package for simulating the one-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably-saturated media. U S Salinity Laboratory, U S Department of Agriculture, California, 2008
- [17] 林青. 土壤中重金属运移的数值模拟及不确定性分析. 青岛: 青岛大学,2011. Lin Q. Numerical simulation and uncertainty analysis of heavy metal transport in soils (In Chinese). Qingdao: Qingdao University, 2011
- [18] Kookana R S, Naidu R, Tiller K G. Sorption non-equilibrium during cadmium transport through soils. Australian Journal of Soil Research, 1994, 32(4): 635—651
- [19] 林青,徐绍辉. 胶体作用下饱和土壤中 Cd 运移的数值模拟. 土壤学报,2013, 50(1): 68—74. Lin Q, Xu S H. Numerical simulation of Cd transport in saturated soils as affected by colloid. (In Chinese). Acta Pedologica Sinica, 2013, 50(1): 68—74
- [20] Selim H M, Iskandar I K. Fate and transport of heavy metals in the vadose zone. New York: CRC Press LLC, 1999: 91—106
- [21] Beigel C, Di Pietro L. Transport of triticonazole in homogeneous soil columns; Influence of nonequilibrium sorption. Soil Science Society of America Journal, 1999, 63(5): 1077—1086
- [22] 廖敏,黄昌勇,谢正苗. pH 对镉在土水系统中的迁移和形态的影响. 环境科学学报,1999, 19(1): 81—86. Liao M, Huang C Y, Xie Z M. Effect of pH on transport and transformation of cadmium in soil-water system (In Chinese). Acta Scientiae Circumstantiae, 1999, 19(1): 81—86
- [23] 胡宁静,骆永明,宋静. 长江三角洲地区典型土壤对镉的吸附及其与有机质、pH 和温度的关系. 土壤学报,2007, 44(3): 437—443. Hu N J, Luo Y M, Song J. Influence of soil organic matter, pH and temperature on Cd sorption by four soils from Yangtze River Delta (In Chinese). Acta Pedologica Sinica, 2007, 44(3): 437—443
- [24] Kinniburgh D G, Milne C J, Benndutt M F. Metal ion binding by humic acid: Application of the NICA-Donnan model. Environmental Science and Technology, 1996, 30(5): 1687—1698
- [25] Selim H M. Modeling the transport and retention of inorganics in soils. Advances in Agron. New York: Elsevier, 1992: 47: 331—384
- [26] 王芳,蒋新,王代长. 模拟酸雨作用下红壤中 Cu^{2+} 的释动力学. 环境化学,2003, 22(4): 340—344. Wang F, Jiang X, Wang D C. Kinetics of Cu^{2+} release from red soil as influenced by simulated acid rain (In Chinese). Environmental Chemistry, 2003, 22(4): 340—344

NUMERICAL SIMULATION AND PREDICTION OF Cd TRANSPORT IN SOILS DIFFERENT IN TEXTURE

Lin Qing¹ Xu Shaohui^{1*} Wang Kaili²

(1 Department of Environmental Science, Qingdao University, Qingdao, Shandong 266071, China)

(2 Research Institute of Environmental Protection, Zhengzhou 450004, China)

Abstract Movement of Cd in soil profiles different in texture was simulated with the advection-dispersion equation for solute transport in an indoor experiment using soil columns. Results show that the chemical nonequilibrium one-site model (OSM) can be used to simulate Cd transport better in silty loam ($R^2 = 0.810$) and loamy sand ($R^2 = 0.901$) than in sandy loam ($R^2 = 0.542$). The OSM can predict accurately the time for Cd to transport through the soil column, but not fit so well the trailing of the breakthrough curve of Cd. The retarding effect of the soil on Cd transport was related to soil physical and chemical properties, however, its mechanism needs to be studied further in depth. At the end, the parameters obtained from fitting with the aforementioned model were used to simulate transport of Cd in soil profiles consisting of soil layers. The simulated breakthrough curves didn't reveal the heterogeneity of the soil profiles. As a result of the strong sorption of Cd by the upper sandy loam layer, it took a long time (10 pv) for Cd to pass through the profile. And moreover, the variation of Cd concentration and adsorption quantity at the interface of two soil layers different in texture was obvious.

Key words Chemical nonequilibrium one-site model; Solute transport; Breakthrough curves; Retarding effect; Layered soil

(责任编辑:汪枳生)