

# 土壤溶质运移的研究进展 Review on the Advances in Soil Solute Transport

徐业梅, 许园园

XU Ye-mei, XU Yuan-yuan

(广西壮族自治区环境监测中心站, 广西南宁 530022)

(Environmental Monitoring Center of Guangxi Zhuang Autonomous Region, Nanning, Guangxi, 530022, China)

**摘要:** 介绍土壤溶质运移理论的发展过程和国内外学者关于土壤溶质运移的研究成果, 探讨其数学模型、数值计算方法以及参数估算方法, 并简要讨论土壤溶质运移的发展趋势。

**关键词:** 土壤 溶质运移 数学模型 数值计算 参数估算

中图分类号: X53 文献标识码: A 文章编号: 1002-7378(2011)02-0167-05

**Abstract:** The theory development of soil solute transport and the research achievements of soil solute transport in domestic and foreign scholars are introduced. The mathematical models, numerical methods and parameter estimation method of soil solute transport are discussed, and the development trend of soil solute transport is also briefly discussed.

**Key words:** soil, solute transport, mathematical model, numerical calculation, parameter estimation

组成土壤液相的并不是纯水而是含有溶质的水溶液, 土壤中溶质运动是自然界多孔介质中溶质运移的一种最常见现象。土壤溶质即土壤溶液中溶质, 包括无机和有机两个部分。自然条件下无机部分包括各类离子, 如  $\text{Ca}^{2+}$ 、 $\text{Mg}^{2+}$ 、 $\text{Na}^+$ 、 $\text{K}^-$ 、 $\text{Cl}^-$ 、 $\text{SO}_4^{2-}$ 、 $\text{HCO}_3^-$  和  $\text{CO}_3^{2-}$ , 还有一些少量的其他离子, 如 Fe、Mn、Zn、Cu 等盐类化合物; 有机部分包括可溶性有机物如氨基酸、腐殖酸、糖类和有机-金属离子的络合物。此外, 尚有一些悬浮的有机无机胶体、“活胶体”即某些细菌和病毒、以及溶解的气体。由于人类的活动, 溶质也可能是一些有机或无机污染物、重金属元素、农药等。

土壤溶质运移所研究的是溶质在土壤中的过程、规律和机理。多年来, 国内外众多科研工作者一直都在致力于土壤中溶质运移理论及模型的应用研究。目前, 土壤溶质运移的研究已成为土壤学、生态

学、水资源学以及资源与环境科学等相关学科的基础和前沿研究领域, 越来越得到重视<sup>[1~4]</sup>。尤其是近年来, 随着化肥、农药污染、污水灌溉引起的地下水和土壤污染等问题日益受到关注, 土壤溶质运移理论的研究已成为一个很活跃的领域。土壤溶质运移的研究近十几年取得的进展有目共睹, 其研究成果促进了土壤学科和相关学科的发展, 在农业生产、资源利用和环境保护方面也得到了广泛应用。本文总结介绍土壤溶质运移理论的发展过程和国内外学者关于土壤溶质运移的研究成果, 探讨其数学模型、数值计算方法以及参数估算方法, 并简要讨论土壤溶质运移的发展趋势。

## 1 溶质运移理论的发展

土壤中溶质运动是自然界多孔介质中溶质运移的一种最常见现象。人们对土壤溶质运移现象的认识由来已久。公元前, 古罗马就有过关于海水通过土壤流入湖泊后变淡和变甜了的记载; 古代农民排水洗盐改土的传统经验中, 也蕴含着水分通过土壤将溶于水中的盐分排出土体的溶质运移现象<sup>[2]</sup>。

对于溶质运移的理论研究始于 20 世纪初, 早在

收稿日期: 2011-03-09

修回日期: 2011-04-20

作者简介: 徐业梅(1987-), 女, 学士, 助理工程师, 主要从事土壤污染治理与修复研究。

1805年, Fick就提出了分子扩散定律<sup>[5]</sup>。Lawis提出水与溶质在田间土壤中的运移并不是一致的; Slichter研究水溶性化合物或示踪剂加入地下水后, 在下游的井中出现的现象, 得出水在土壤毛管孔的中心较近孔壁中心的水流动较快的结论; 1930年, Tepacnmong提出利用水盐平衡研究法预报地区水盐动态; 随后, Kitagawa从不饱和的沙土分析NaCl点源的弥散现象, 提出混合过程可作为平均孔隙流速函数的论点; Martin和Syszye利用色层分离理论, 进一步说明了不同溶质通过多孔介质时其运动速率的差别<sup>[2, 5, 6]</sup>。

土壤溶质运移的主要研究是在近50年, 从20世纪50年代起, Taylor、Bear、Nielsen、Breasler等<sup>[7]</sup>在实验的基础上, 提出混合置换理论, 并从实验和理论的角度进一步说明土壤溶质运移过程中对流、弥散和化学反应的耦合性质, 从而开创了应用数学模型来说明和解释溶质运移过程的局面。Taylor首先定量研究毛管中的纵向弥散作用<sup>[6]</sup>; Aris将Taylor的方法应用于不规则形状的毛管, 认为局部的速度分布不是抛物线的<sup>[6]</sup>; Bear<sup>[8]</sup>将水动力弥散理论归属于可混流体的驱替理论, 他总结了弥散机理和确定各种参数的研究方法, 通过对水盐机理的进一步研究, 使人们有可能用数学模型对溶质运移、转化过程的研究逐步趋于定量化和提高预测精度。

从20世纪70年代起, 研究工作由实验室走向田间, 研究者发现室内研究结果跟田间有很大差别, 因此开始了土壤性质空间变异性的研究。20世纪80年代以后至今的研究阶段, 是学者们专注于土壤溶质运移对盐渍化的影响、化学污染物在土壤中的传输和特定运移因子作用的时期。先进的观测手段与计算机技术的结合, 使得研究更加深入和便捷<sup>[9]</sup>。

我国从20世纪80年代初开始起步, 早期做过这方面工作的有石元春、贾大林等<sup>[10]</sup>。20世纪80年代中后期李韵珠等<sup>[2]</sup>运用水动力学模型, 研究了非稳态蒸发条件下夹粘层的土壤水盐运动; 史海滨、陈亚新<sup>[11]</sup>对饱和-非饱和和溶质条件下溶质运移模型与数值方法进行了评价。20世纪80年代后期, 张蔚榛等<sup>[12]</sup>将数值模型应用于区域水盐预测预报中, 使我国区域水盐运动的研究进入一个新的阶段, 同时在地下水污染方面也做了不少的工作。

目前对溶质运移模型的研究已经从饱和地下水发展到非饱和的土壤水, 从沙土扩展到壤土、粘土, 由单一条件发展到蒸发条件和入渗条件下溶质运移

并举<sup>[13]</sup>。

## 2 土壤溶质运移的数学模型

溶质在土壤中的运移涉及的因素特别多, 因此研究时需要考虑的不仅是土壤物理学, 还有土壤化学、水动力学、农业灌溉等方面的问题。

随着计算机的发展, 数学模型手段逐渐引入到溶质运移研究中, 研究经历了定性、半定量化和量化3个阶段, 目前已得到了很多有效的数学模型。Butters和Jury把土壤溶质运移模型分为3类: 确定性模型、随机模型和传递函数模型<sup>[2]</sup>。

### 2.1 确定性模型

确定性模型是由可以获得数值解或解析解的对流-弥散方程(convection-dispersion equation, CDE)推导而来。1952年, Lapidus和Amundson首先提出了一个类似于对流-弥散方程(CDE)的模拟模型<sup>[2]</sup>; Scheidegg将其扩展到三维的情况, 并考虑了溶质运移时的水动力弥散作用<sup>[2]</sup>; Rifai又考虑了溶质运移时的分子扩散作用, 并引入了“弥散度”来表征土壤特性对溶质运移的影响<sup>[2]</sup>; Nilsen和Biggar从理论上推导建立了对流-弥散方程, 并首次系统地论证了CDE方程的科学性和合理性<sup>[14]</sup>。从Nilsen建立CDE方程以来, 该方程一直应用至今, 是土壤溶质运移理论研究的经典方程和基本方程<sup>[15]</sup>。该模型可较好地揭示溶质在均质多孔介质中的运移机理及时间、空间对溶质运移的影响。

随着研究的深入, 研究人员发现弥散度是随着实验土柱长度增加而变化, 并非一个常数<sup>[16]</sup>。为了改进对流弥散理论, Coats和Smith提出了稳态条件下可动和不可动区溶质运移的两区模型<sup>[17]</sup>。两区模型由于考虑了土壤中不动水体的存在以及不动水体在溶质运移过程中所起的作用, 因而能更好地描述土壤中溶质的运移过程。从20世纪80年代开始, 我国开始了这方面的研究, 近年来已趋于成熟。宋运良给出了基于CDE方程的污灌数学模型<sup>[13]</sup>; 张德生等利用CDE模型给出了考虑随深度变化的一阶降解和随深度变化的线性平衡吸附时一维的反应溶质运移的CDE方程<sup>[13]</sup>; 李勇等<sup>[18]</sup>采用考虑不动水体和忽略不动水体两种CDE模型通过室内土柱实验研究了保守性物质在土壤中运移的特性。

### 2.2 随机模型和传递函数模型

随机模型也叫黑箱模型, 是由Jury和Bresler等在承认经典的CDE方程的前提下提出的<sup>[19]</sup>。他们认为田间土壤中的溶质运移现象是土壤内在的不

稳定过程,假定区域土壤的空间变量是随机分布的,因而 CDE 中的各系数变为由空间坐标描述的方程。随机模型从 20 世纪 80 年代至今已进行了大量研究,是目前模拟大田模拟运移规律的最有效模型,其中 Jury 等<sup>[19]</sup>提出的传递函数模型(transfer function model, TFM)理论,为土壤溶质运移模拟开辟了新的途径,该模型最大的特点是便于考虑空间变异性及土壤各向异性问题,对田间溶质运移研究是十分方便的<sup>[6]</sup>。TFM 从理论产生到逐步完善,从研究示踪保守溶质到反应性溶质,从室内土柱实验的模拟到田间试验的仿真,取得了大量的成果<sup>[20]</sup>。目前国外学者对传递函数模型的应用仍方兴未艾,而在国内,对 TFM 的应用尚不多见。叶自桐<sup>[21]</sup>研究了入渗条件下土壤的水盐动态;杨金忠等<sup>[22]</sup>进行了地下水动态预报的多层递阶组合模型研究;吴吉春等<sup>[23]</sup>和吴耀国等<sup>[24]</sup>建立了地下水污染系统的数学模型;任理等<sup>[20]</sup>应用 TFM 研究了稳定流场中均质土壤的盐分运移和非稳定流场中非均质土壤的盐分和硝态氮稳定流场中均质土壤的盐分运移和硝态氮淋失,取得了很好的结果。

### 3 溶质运移的数值计算方法

对溶质运移规律的模拟除了要有准确、充足的数据外,还取决于计算方法的选择。正确的数值计算方法不但影响计算精度和效率,对方程的实际应用也起到了至关重要的作用。方程的计算方法一般有解析法和数值法。但是由于溶质问题的复杂性,只有在理想化的条件下才能求得解析解,所以数值法是常用方法。目前关于溶质运移方程的数值解法归纳起来主要可以分为 3 类:(1)欧拉观点,就是以固定不动的坐标系为参考系;(2)拉格朗日观点,它以跟随流体质点运动的坐标为参考系;(3)将两者结合起来的欧拉—拉格朗日观点。

关于溶质运移的数值计算方法主要有:有限差分法、有限元法、二维有限分析数值解、特征有限元法、特征差分法、沿流线跟踪法、迎风差分法、运动坐标系求解法、连续可动质点法等等。但是当问题的 Peclet 数较高时,会出现“数值弥散”和“数值波动”现象。为了克服这个困难,一般数值方法采用加大剖分网格密度,但是在解决高维问题及区域性问题时,计算工作量较大。于是,Frind 提出了 Peaceman 交替方向 Galerkin 有限单元法<sup>[13]</sup>。有人又把特征法的思想引入到 Frind 交替方向中,提出了交替方向特征有限单元法<sup>[18]</sup>。其后,又有人引用 N. N.

Yanenko 的时间分裂思想,即时间分裂 Eulerian-Lagrangian 有限差分法等<sup>[13]</sup>。这种方法将多维问题分解成几个一维问题,对每个一维问题采用 Eulerian-Lagrangian 求解,使计算量大大减少<sup>[13]</sup>。

### 4 溶质运移的参数估算方法

参数的估计是溶质在土壤及地下水中迁移转化规律模拟计算的关键问题,尤其是一些关键参数,如非饱和土壤水力弥散系数( $D_0$ ),孔隙水流速( $u_0$ )等,这些参数的精度直接决定模型的准确性。在土壤溶质运移理论的研究中,如何简便、准确地确定参数一直是研究的重点。

Parker 等<sup>[25]</sup>提出了由 BTC 数据同时估算两个或多个参数的方法。Jury 和 Sposito<sup>[26]</sup>提出了 3 种由 BTC 数据同时估算  $u_0$  和  $D_0$  的方法,即最小二乘法、最大似然法和矩法。Yamaguchi<sup>[27]</sup>于 1989 年提出了同时估算  $u_0$  和  $D_0$  的斜率法及等斜率法,该法由对流—弥散方程的分析结果导得,计算快速而简单,对饱和及非饱和流均适用。但是, Yamaguchi 等人只是引用前人的两组在  $u_0/D_0$  值较大时的实验数据对方法进行了有限检验。任理等<sup>[28]</sup>在此方法的基础上,应用斜率法遍历全部穿透曲线数据来考察参数的估计精度,并与实测值、简化解析解及矩法的计算结果进行比较后,认为斜率法取穿透曲线上中段中后部的数据时,求参精度较高。Shao 等<sup>[29]</sup>提出了溶质运移过程的边界层理论估计 CDE 参数的新方法,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。石辉等<sup>[30]</sup>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,该方法具有明确的物理意义且简单易行,并且有很高的精度。王超等<sup>[31]</sup>运用优化技术来估算水分和溶质迁移转化耦合模型参数,并采用 Gauss-Newton 最小化算法的 Levenberg-Marquardt 修正法来实现反求参数的迭代问题。刘春平等<sup>[32]</sup>基于土壤中溶质运移的对流—弥散方程(CDE)提出了溶质运移参数估计的图解方法,该方法直观、简便,并可全部在 Microsoft Excel 上完成,估计参数具有较高的精度而且计算结果稳定。

### 5 土壤溶质运移的发展趋势

土壤溶质运移在人类生产和生活方面起着举足轻重的影响,它不仅关系到土壤盐渍化问题,还会发展成为更广泛和深远的水土、环保问题,对农业生产、土壤污染防治具有重要的指导意义,因此越来越

引起人们的重视。溶质运移模型的建立,基本方程的求解,为溶质运移研究的发展打下了良好的基础。但是,在某些研究方面还存在一些局限,比如:定量描述大孔隙和优先流情况下的土壤水和溶质运移方程,现在已经成为研究热点,其运移的溶质不能用吸附平衡理论去解释和预测;大部分模型是在某些具体条件和专门目标下建立的,缺乏经验和一般性指导意义,存在大量重复劳动;虽然饱和流条件下的溶质运移的各类参数的测定已较为成熟,但是由于非饱和流本身的复杂特性,使得对参数的测定相当困难;溶质运移的影响因素比较多,很难通过简单的理论分析来推导出模型的有关参数等。

因此,今后的土壤溶质运移研究重点应放在:进一步研究和改进模型的准确性、灵活性、通用性和操作性;通过实验资料选定模型求取参数时,不仅应充分考虑土壤内部水、热、气要素,而且还要考虑气候因子(如冻融、干湿交替、蒸发、入渗、降水)及人工因素(灌溉、排水、耕作)等的综合作用,土壤的pH值也是土壤的一个重要化学性质,对土壤的许多化学反应和化学过程都有很大影响,pH值在土壤中的氧化还原、沉淀溶解、吸附、解吸和配位反应起支配作用,因此也应着重考虑其影响;土壤溶质运移理论的研究应从封闭的室内土柱试验更加扩展到野外大田观测,以获取足够的资料来确切地描述溶质运移过程,使理论研究与生产实际问题联系更紧密。

由于人类活动的影响,化肥和农药使用量的增加,工业废水的大量排放,污染物的不当处理等,都能带来土壤和地下水的重大污染。农药、化肥、重金属等在土壤中的运移及其对土壤和水体的污染已经成为全球性问题,这些都必须根据土壤溶质运移的理论和特性加以研究和进行管理。如广西特殊的喀斯特岩溶地貌,一些地区地表水或地下水污染导致土壤污染形成的历史遗留问题,尤其是重金属污染,可以考虑借鉴土壤溶质运移理论及数学模型和相关参数估算方法作为支撑进行研究分析,为后续土壤污染治理及生态修复提供支持。而且目前针对广西岩溶地区重金属污染的系统研究甚少,使得岩溶地区重金属污染与生态修复缺少理论支持。因此,选择典型岩溶地区重金属重污染场地开展深入研究,弄清重污染场地土壤重金属种类、浓度、分布及迁移转化规律,揭示岩溶矿区特殊水动力条件下重金属的赋存迁移特征,开展修复试验研究,总结出适合广西的土壤溶质运移数学模型和计算方法及其相关

的参数估算方法,对广西土壤环境污染研究与生态修复均具有重要意义。

#### 参考文献:

- [1] Kutilek M, Nielsen D R. Soil hydrology; Textbook for students soil science, agriculture, forestry, geocology, geomorphology or other related disciplines[M]. Catena-Verl, 1994.
- [2] 李韵珠, 李保国. 土壤溶质运移[M]. 北京: 科学出版社, 1998.
- [3] Selim H M, Sparks D L. Physical and chemical processes of water and solute transport/retention in soils[M]. SSSA Special Publication No. 56, Soil Sci Soc Am, Inc Madison, Wisconsin, 2001.
- [4] Dane J H, Topp G C (Co-editors). Methods of soil analysis Part 4: Physical methods[M]. Soil Sci Soc Am, Inc Madison, Wisconsin, USA, 2002; 1253-1531.
- [5] 石元春. 盐渍土的水盐运动[M]. 北京: 北京农业大学出版社, 1986.
- [6] 王全九. 土壤溶质迁移特性的研究[J]. 水土保持学报, 1993, 7(2): 10-15.
- [7] 刘霄, 熊耀湘. 土壤溶质运移研究现状[J]. 水利科技与经济, 2006, 12(6): 355-358.
- [8] Bear J. 多孔介质流体力学[M]. 北京: 中国建筑工业出版社, 1983.
- [9] 侯春霞, 胡海英, 魏朝富, 等. 土壤溶质运移研究动态及展望[J]. 土壤通报, 2003, 34(1): 70-73.
- [10] 许秀元, 陈同斌. 土壤中溶质运移模拟的理论与应用[J]. 地理研究, 1998, 17(1): 99-106.
- [11] 史海滨, 陈亚新. 饱和-非饱和流溶质传输的数学模型与数值方法评价[J]. 水利学报, 1993(8): 49-55, 58.
- [12] 张蔚榛. 地下水非稳定流计算方法 and 地下水资源评价[M]. 北京: 科学出版社, 1983.
- [13] 徐冰, 郭克贞, 王耀强, 等. 土壤中溶质运移的研究现状及问题[J]. 内蒙古水利, 2003(3): 20-21.
- [14] Nielsen D R, Biggar J W. Miscible displacement in soils; Experimental information[J]. Soil Sci Soc Am Proc, 1961, 25: 1-5.
- [15] 魏新平. 溶质运移理论的研究现状和发展趋势[J]. 灌溉排水, 1998, 17(4): 58-63.
- [16] 王全九. 土壤溶质迁移理论研究进展[J]. 灌溉排水报, 2005, 24(3): 77-80.
- [17] Coats J C, Smith B D. Dead-end pore volume and dispersion in porous and unsaturated sandstone[J]. Soil Sci Soc Am Proc, 1964, 27: 258-262.
- [18] 李勇, 王超, 汤红亮. 土壤中不动水体对溶质运移影响模拟研究[J]. 农业环境科学学报, 2005, 24(1): 104-108.

- [19] Jury W A Sposito, White R E. A transfer function model of solute transport through soil fundamental concepts[J]. *Water Resour Res*, 1986, 22(2): 243-247.
- [20] 马军花. 农田土壤硝态氮运移动态的数值模拟[D]. 南京农业大学资源与环境科学学院, 2002.
- [21] 叶自桐. 利用盐分迁移函数模型研究入渗条件下土层的水盐动态[J]. *水利学报*, 1990(2): 1-8.
- [22] 杨金忠, 蔡树英. 地下水动态预报的多层递阶组合模型[J]. *水科学进展*, 1995, 6(2): 101-106.
- [23] 吴吉春, 薛禹群, 谢春红. 越流含水层系统中的溶质运移方程[J]. *水文地质工程地质*, 1998(1): 30-31.
- [24] 吴耀国, 吴伟传. 饱和与非饱和流溶质运移的实验研究与数学模拟[J]. *勘察科学技术*, 1998(5): 37-39, 45.
- [25] Parker J C, Van Genuchten M T. Determining transport parameters from laboratory and field tracer experiments[J]. *VA Agric Exp Stn Bull*, 1984, 84(3): 83-84.
- [26] Jury W A. Simulation of solute transport using a transfer function model[J]. *Water Resour Res*, 1982, 18(2): 363-368.
- [27] Yamaguchi T, Moldrup P, Yokosi S. Using breakthrough curves for parameter estimation in the convection-dispersion model of solute transport[J]. *Soil Soc Am J*, 1989, 53: 1635-1640.
- [28] 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[J]. *水利学报*, 1999(11): 1-6.
- [29] Shao Ming-an, et al. An approximate solution to the convection-dispersion equation of solute transport in soil[J]. *Soil science*, 1998, 163(5): 339-345.
- [30] 石辉, 郑纪勇, 邵明安. 土壤溶质运 CDE 模型参数估计的一种新方法——截距法[J]. *土壤学报*, 2003, 40(1): 136-139.
- [31] 王超, 顾斌杰. 非饱和土壤溶质迁移转化模型参数优化估算[J]. *水科学进展*, 2002, 13(2): 184-190.
- [32] 刘春平, 叶乐安, 邵明安, 等. 土壤溶质运移参数估计图解方法[J]. *土壤学报*, 2004, 41(5): 715-719.

(责任编辑: 邓大玉)

(上接第 166 页)

### 3.4 加强现代化的环境应急基础理论和技能培训

有效的环境应急不仅依靠详实的数据信息、先进的应急技术支撑, 还需要有一支过硬的高素质的应急管理队伍。随着世界各国对环保科研工作的日益重视和投入的持续加大, 现代化的环境应急知识和应急技能得到了快速的发展, 知识更新很快, 环保系统中的应急、监测、污控、监察等作为环境应急的专业骨干队伍, 应加强现代化应急与防范知识的学习和培训力度, 开展系统的再教育工程, 从理论知识到实际技能, 以及先进设施设备和软硬件的使用, 切实提高应急人员的综合素质, 才能利用好手上的各种资源, 发挥它们的功力, 真正担负起新时期环境保

护的重任。

#### 参考文献:

- [1] 张宝春, 琚鸿. “数字环保”体系及战略意义探讨[J]. *广州环境科学*, 2002, 17(1): 38-41.
- [2] 刘忠瑞. 浅谈基于“数字新疆”的“数字环保”建设[J]. *新疆环境保护*, 2008, 30(3): 42-44.
- [3] 李小文, 刘锐, 姚新, 等. 数字环保理论与实践[M]. 北京: 科学出版社, 2010: 239-242.
- [4] 郭振仁, 张剑鸣, 李文禧. 突发性环境污染事故防范与应急[M]. 北京: 中国环境科学出版社, 2006: 11-13.

(责任编辑: 尹 闯)