

饱和非饱和土壤中溶质 运移的数值模拟*

邱克俭 戚隆溪 秦宁

(中国科学院力学研究所,北京,100080)

提要 本文结合拉格朗日观点的运动坐标与欧拉观点的固定坐标,分别求解对流-弥散方程的对流效应和弥散效应,并在从固定坐标向运动坐标投影时利用了三次样条插值方法,使模型更为精确而简单。通过与特定情况下的理论解比较,说明模型是准确可靠的。通过与实验室室内试验结果比较,模型的可靠性得到了进一步的验证。利用模型对淡水洗盐结合浅群井抽排咸水治理盐碱地过程的模拟分析,认为结合浅群井抽排可较大地提高淡水洗盐的效果。

关键词 溶质运移,样条插值,淡水洗盐

现实中可溶性物质常聚集于土壤表面,驻留在作物根区,并随土壤水运动。为估计其危害,须深入研究它们在土壤中的运动规律,为环境优化管理和水土污染控制提供合理依据。

从60年代起,溶质运移的数值模拟开始逐步发展。如:Shamir和Harleman^[1],Price等^[2],Guymon^[3]Oster等^[4]考虑了饱和及固定非饱和含水量下的溶质运移情况,流动为定常速率。Bresler和Hanks^[5]考虑了非饱和和非定常对流运动条件下的溶质运动,但忽略了扩散的影响。Eshel Bresler^[6]综合考虑了溶质在对流扩散作用影响下的运动,但忽略了溶质的吸附解析过程。徐玉佩^[7]用有限元法研究了二维饱和溶质运移规律,并对冲洗改良盐碱地措施进行了数值模拟。应用数值方法模拟多孔介质中的溶质运移,方法有有限差、有限元等。在求解对流扩散方程时,当扩散作用较强,这些方法都可获得满意结果,而当对流作用较强,有限差和有限元会出现数值波动和数值弥散现象。为解决这一问题,Thomson^[8]和杨金忠^[9]分别提出用可动网格和固定网格分别计算对流和扩散效应的分步投影法和在陡峭的浓度峰面附近放置可动质点的连续可动质点法及网格随溶质质点运动的沿流线连续追踪法。分步投影法也有一定的数值弥散,而后两种方法对以对流或以扩散为主的问题都能有满意结果,但在解二维问题时,连续可动质点法不易实现,而沿流线连续追踪法可能出现单元畸形问题且程序编制复杂。徐玉佩^[11]提出一种先沿流线计算纯对流作用引起的溶质质点位移,再在剖分节点上进行扩散计算的沿流线分段追踪法,克服

* 本文为国家自然科学基金资助项目。

本文于1992年1月31日收到第1稿,1992年3月24日收到修改稿。

了连续追踪时的单元畸形问题。但因用了线性插值, 也造成一定的数值弥散。用三次样条插值可以在流线较平缓的区域降低以至消除数值弥散; 而在渗流流场变化剧烈的区域, 由于流线弯曲, 沿流线进行样条插值则很困难。本文基于欧拉-拉格朗日坐标相结合的思想, 分别求解对流和扩散效应, 消除了数值波动和弥散。在从运动坐标向固定坐标插值时, 利用三次样条, 从而避免了线性插值所造成的数值弥散。对二维问题由于回避了沿特征线进行样条插值, 因而没有单元畸形问题, 程序也比较简单。

一、原 理

溶质在土壤水中的运动, 主要受到对流和扩散的控制。在土壤中, 溶质的分子扩散宏观上可由 Fick 第一定律描述。即:

$$J_p = -D_p \frac{\partial C}{\partial z} \quad (1.1)$$

J_p (g/cm^2) 为溶质的分子扩散通量; D_p (cm^2/hr) 为溶质的分子扩散系数; C (g/cm^3) 为溶质在土壤溶液中的浓度; z (cm) 为深度坐标。土壤中溶质的分子扩散系数 D_p 比自由水体系统中相应的扩散系数 D_0 小。Porter 等^[12]及 Kemper 和 Schaik^[13] 的研究表明: 在实用范围内, 溶质在土壤中的分子扩散系数与溶质的浓度无关而只与土壤含水量有关:

$$D_p(\theta) = D_0 a e^{b\theta} \quad (1.2)$$

θ 为土壤体积含水量; a , b 为土壤特性参数。Olsen 和 Kemper^[14] 的研究表明, 当 $b = 10$, $a = 0.001 \sim 0.005$ 时, 上式计算的 D_p 在粘土到砂壤土类型的土壤中与实测值吻合。

一般, 分子扩散与对流传导是共存的, 两者同时影响最终的扩散效果。普遍认为, 宏观上的对流传导应包括平均速度下的流动及机械弥散, 即在对流作用下溶质以溶液平均流速流动的同时, 在湿润峰面附近发生机械弥散, 而机械弥散的数学处理与分子扩散的基本相同, 只要将 D_p 换成机械弥散系数 D_h 即可。Perkins 和 Johnston^[15], Passioura^[16] 的工作表明, 机械弥散系数 D_h 依赖于溶液的平均流速。在饱和和定常流动的条件下, D_h 通常被表示为:

$$D_h(V) = \lambda |V| \quad (1.3)$$

λ (cm) 为弥散度, 是表征多孔介质特性的经验系数。一般, 粘土: $\lambda = 1.5cm$, 粉砂壤土: $\lambda = 1.0cm$, V (cm/hr) 为土壤溶液的平均渗透流速。假定在非饱和情况下也有如上之关系。分子扩散和对流的综合效应可用数学形式表示为:

$$J = -[D_h(V) + D_p(\theta)] \frac{\partial C}{\partial z} + V\theta C = -D(V, \theta) \frac{\partial C}{\partial z} + qC \quad (1.4)$$

$$D(V, \theta) = \lambda |V| + D_0 a e^{b\theta} \quad (1.5)$$

D (cm^2/hr) 为综合分子扩散和机械弥散的水动力弥散系数, J ($g/cm^2/hr$) 为动力弥散引起的溶质通量, q (cm/hr) 为土壤溶液通量。

土壤中由于渗透、水分重新分布、蒸散作用所导致的含水量变化, 必然导致水和溶质的运动。而且在自然状态下很少有定常流动存在。由连续性, 土壤溶液运动的一维数学

描述为:

1. 水动力学方程

$$\left. \begin{aligned} \tilde{C}(h) \frac{\partial h}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h) \frac{\partial h}{\partial z} \right] - \frac{\partial K(h)}{\partial z} & z \in \Omega \\ h(z, t) |_{t=t_0} &= h_0(z) & z \in \Omega \\ h(z, t) &= h_1(t) & z \in \Gamma_1 \\ K(h) \left[\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right] &= -q(z, t) & z \in \Gamma_2 \end{aligned} \right\} \quad (1.6)$$

$\Gamma_1 + \Gamma_2 = \Gamma$, $\Gamma_1 \cap \Gamma_2 = 0$. Γ 为 Ω 的边界. Γ_1 为取一类边条件的边界; Γ_2 为取二类边条件的边界. 在土表积水饱和时, 上边界条件以一类形式给出, 而在土表无积水时, 可通过观测手段确定土表面的水通量, 边条件可以二类形式给出. 底部边条件以二类形式给出为宜, 当考虑以潜水位为动边界时, 又以一类形式给出为好. $h(\text{cm})$ 为水势, $K(\text{cm/hr})$ 为导水率, $\tilde{C}(1/\text{cm})$ 为水容.

2. 溶质运移方程

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\theta C) &= \frac{\partial}{\partial z} \left[D(V, \theta) \frac{\partial C}{\partial z} \right] - \frac{\partial}{\partial z} (qC) & z \in \Omega \\ C(z, t) |_{t=t_0} &= C_0(z) & z \in \Omega \\ C(z, t) &= C_1(t) & z \in L_1 \\ \left[-D(V, \theta) \frac{\partial C}{\partial z} + qC \right] &= \begin{cases} qC_{\text{地表水入渗}} \\ 0 \\ \text{蒸发} \end{cases} & z \in L_3 \\ \left[-D(V, \theta) \frac{\partial C}{\partial z} + qC \right] &= qC_{\text{地下水}} & z \in L_4 \end{aligned} \right\} \quad (1.7)$$

$L_3 + L_4 = L_2$, $L_1 + L_2 = L$, $L_1 \cap L_2 = 0$. L 为 Ω 的边界. L_3 为上表面; L_1 为取一类边条件的边界; L_2 为取二类边条件的边界. 入渗时, 上表面取一类形式边条件, 蒸发时, 上表面溶质通量为零, 取二类形式边条件方便. 底部边条件由一类形式给出. $C [g/l]$ 为溶质浓度.

二、数值计算方法

对方程 (1.6) 用隐式差分格式通过迭代确定系数 \tilde{C} , K . 方程 (1.7) 由连续性可表示为:

$$\theta \frac{DC}{Dt} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial C}{\partial z} \right);$$

$$\theta^{i+\frac{1}{2}} \frac{C_i^{i+1} - \bar{C}_i^i}{t^{i+1} - t^i} = \frac{1}{z_{i+\frac{1}{2}} - z_{i-\frac{1}{2}}} \left[D_{i+\frac{1}{2}}^{i+\frac{1}{2}} \frac{C_{i+1}^{i+1} - C_i^{i+1}}{z_{i+1} - z_i} - D_{i-\frac{1}{2}}^{i+\frac{1}{2}} \frac{C_i^{i+1} - C_{i-1}^{i+1}}{z_i - z_{i-1}} \right] \quad (2.1)$$

其中 \bar{C}_i^i 为对流贡献. 根据拉格朗日全导数的物理意义, 当前时刻某点的对流贡献来自于质点运动的轨线(即特征线)上游某点在上一时刻的溶质浓度. 由水动力学方程结合达西定律可求出土壤中任一点的孔隙流速, 并确定当前时刻位于网格上的流体质点在上一时刻的位置, 用三次样条拟合可确定这些位置在上一时刻的盐分浓度, 并将其作为当前时

刻网格点上的浓度带入溶质运移方程,确定当前时刻最终的浓度。

三、土壤特征曲线,水容曲线,土壤导水率曲线

土壤特征曲线由对实验数据点进行三次样条拟合得到,实验数据预先经过适当的调

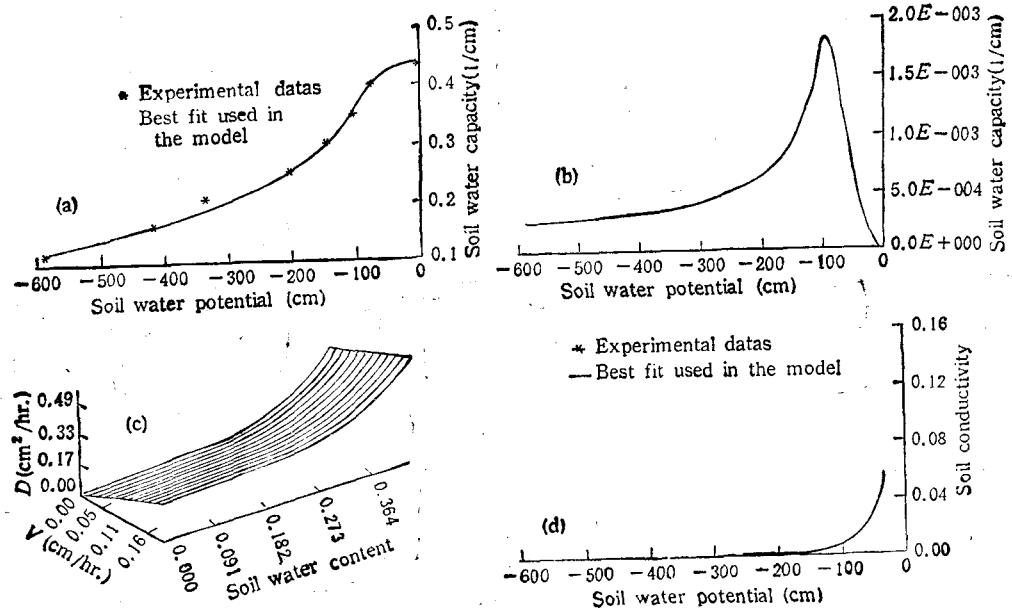


图 1 参数曲线图
Fig. 1. Parameter curves

- (a) 土壤特征曲线
- (a) Moisture characteristic curve of a soil
- (b) 水容曲线
- (b) Soil Water Capacity Curve
- (c) 水动力弥散系数曲线
- (c) Hydrodynamical diffusivity curve
- (d) 土壤导水率曲线
- (d) Soil conductivity curve

整,使曲线符合物理规律。对拟合曲线取导数可得水容曲线,土壤导水率曲线也由相同的方法获得。图 1 为各种参数曲线的示意图。

四、数值方法的检验及讨论

当土壤含水层均质各向同性,平均孔隙流速 V 为常数,起始时刻计算域内各点溶质浓度为零,含水量均为 θ_s , 上边界初始时刻存在浓度突变 C_0 时,在短时间内,溶质运移方程有解析解:

$$C = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{z - Vt}{2\sqrt{Dt/\theta_s}} \right) + \exp \left(\frac{zV}{D/\theta_s} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{z + Vt}{2\sqrt{Dt/\theta_s}} \right) \right]$$

图 2 显示了本文方法及线性投影法与解析解的比较结果。

线性投影方法: 当活动网格在单位时间步长中移动的距离由于渗透流速较大而超过格点间距形成外差(图 2a) 或由于渗透流速较小而小于格点间距形成内差(图 2b) 时, 分别造成两个方向上的数值弥散,而当等于格点间距(图 2c) 时出现跳动,仅当渗透流速

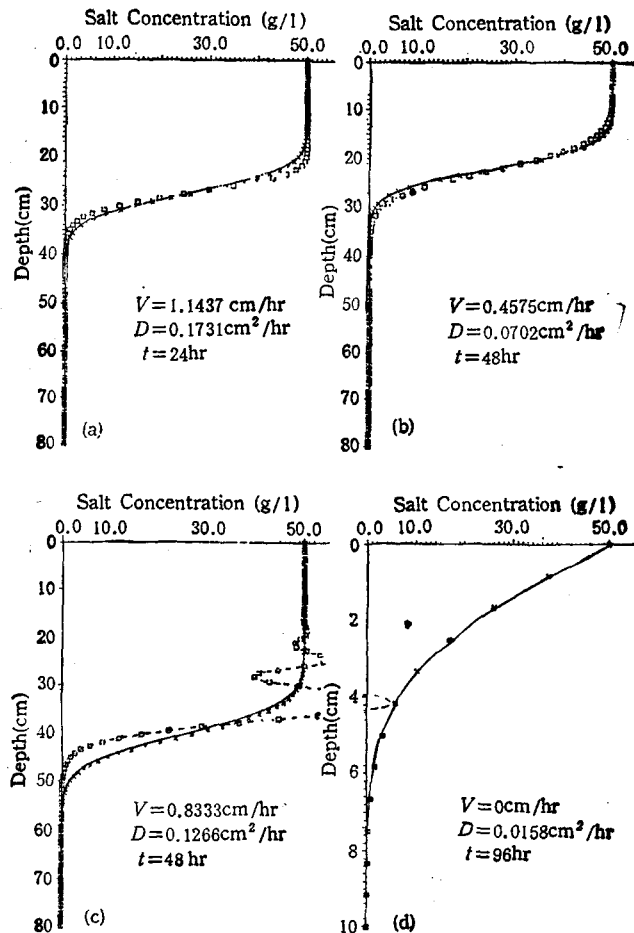


图2 数值方法与解析解的比较

Fig. 2. Comparison of computation and exact solution

— Exact solution × Method of this paper □ Linear projection method

为零(图 2d) 时与解析解吻合。

本文方法：在上述四种情况下都与解析解吻合，从而初步验证了这一方法的可靠性。

五、计算结果及讨论

与室内实验的对比：本文将实验室内一维垂直入渗洗盐模拟实验的测量值与数值模拟的计算结果进行了比较。室内实验是在一圆形垂直土柱中进行的，实验过程中土柱处于饱和状态。初始含盐量分布模拟田间情况。计算结果与实验结果吻合。参见图 3。

与田间实验的对比：淡水压盐结合浅群井抽排咸水的盐碱地改良技术是最近几年才实际应用的新技术。运用数学模型模拟并分析其洗盐过程，可以从理论上为该技术提供有力的依据。结合山东省禹城县中国科学院北京地理所北丘洼试验站的抽咸洗盐试验，本文进行了计算模拟和分析。图 4 中给出了 11 天洗盐过程的模拟结果及与部分实测数据的对比。从图中可以看出，在上表面积水饱和和底部抽水排咸时，土层中水的孔隙流速较

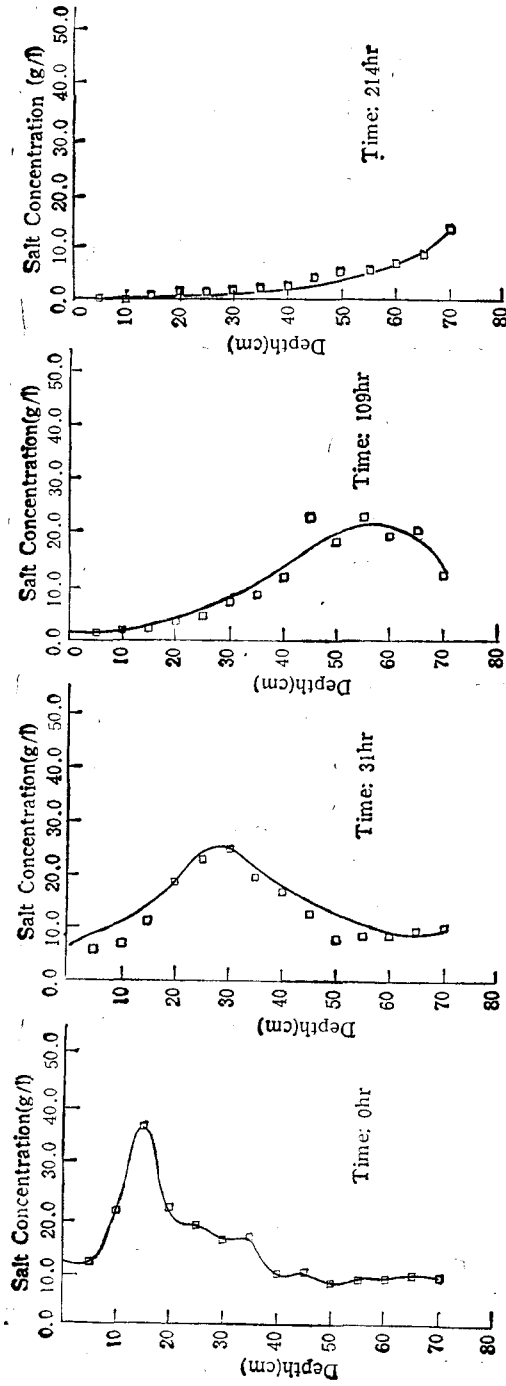


图 3 数值计算与室内实验的比较
Fig. 3. Comparison of computational and experimental profiles for the column case

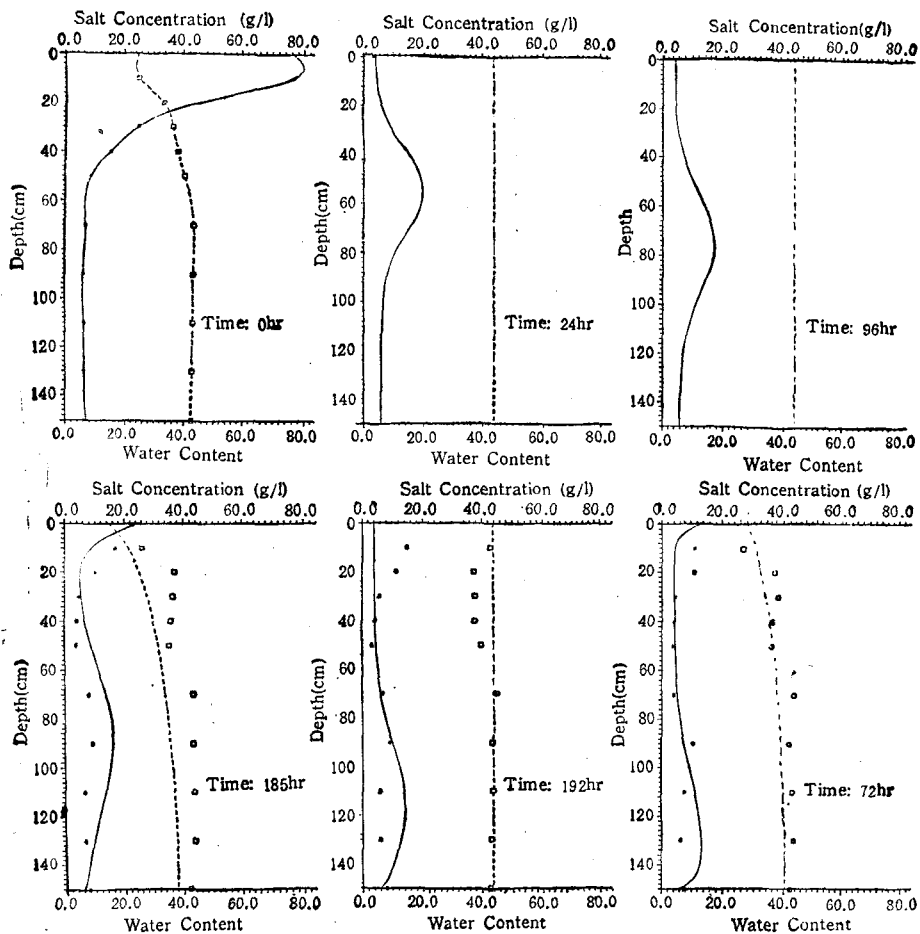


图4 数值计算与田间实验结果的比较

Fig. 4. Comparison of computational and experimental profiles for the field case

— Computational salt concentration * Salt concentration for the field test
 --- Computational water content □ Water concentration for the field test

大,而原积聚于表层的盐分形成一聚积区以较快的速度被压向土壤底部,同时聚积区范围扩大峰值减小。而当上表面干涸,土壤水通过土表向外蒸发,由于缺少补给,土层中水量减少造成底部抽排水速度大幅度降低时,土层中水的孔隙流速减小并出现负向流速。此时,盐分聚积区基本不再向下移动,而在土表出现了返盐现象。当土表再次积水饱和,土层中水的孔隙流速增大时,盐分聚积区便开始被压向底部。由此可见,土壤中水的流动速度对洗盐的效果起着决定性的作用。而积水压盐结合底部抽排可以提高水的流动速度,从而充分发挥水流速愈大对洗盐效果愈好的作用。

六、结 语

盐碱地的改良是我国农业生产中的重要课题,淡水压盐治理盐碱是一种简单而有效的手段。通过对淡水压盐的物理过程的研究及其不同实施方法的评价,可以使这一治理

手段发挥更大效用。

今后的工作将是对蒸散条件下返盐过程的研究以及模型精度的提高, 这之中包括根系吸水、土壤分层、大气条件、地表径流、高精度差分方法等。如果进一步考虑到植物的生理过程, 就将是一个系统的研究植物对土壤中溶质运移影响的数学模型。而单就模型的土壤水动力学计算这方面来说, 这一模型也可以用于作物耗水量的计算模拟, 可对区域性水量调配提供理论依据。通过计算结果与田间试验结果比较可以看出, 土壤中水平方向的流动对土壤溶质的空间分配起着不容忽视的作用。而如果要从量的角度上探讨这一作用, 这就是描述土壤中溶质运移的二维模型所要完成的工作了。

参 考 文 献

- [1] Shami U Y, Harleman D R F. *Water Resour Res.* 1967, (3): 557—581
- [2] Price H S, Cavendish J S, Verga R S. *Soc Petrol Eng J.* 1968, (8): 293—303.
- [3] Guymon G L. *Water Resour Res.* 1970, 6: 204—210.
- [4] Oster G A, Sonnichsen J C, Jeske R T. *Water Resour Res.* 1970, (6): 1746—1752.
- [5] Bresler E, Hanks R J. *Soil Sci Soc Amer Proc.* 1969, 33: 872—882.
- [6] Bresler E. *Water Resour Res.* 1973, (9): 975—986.
- [7] 徐玉佩. 水利学报. 1983,(4): 1—15.
- [8] Thomson N R, Sykes J F, Lennox W C. *Water Resources Res.* 1984, (20): 391—399.
- [9] 雷志栋, 杨诗秀, 谢森传. 土壤水动力学. 1989: 57—67.
- [10] 杨金忠. 武汉水利电力学院学报, 1985,(1): 123—135.
- [11] 徐玉佩. 水利学报. 1986,(12): 38—47.
- [12] Porter L K, Kemper W D, Jackson R D, Steward B A. *Soil Sci Soc Amer Proc.* 1960, 24: 460—463.
- [13] Kemper W D, van Schaik J C. *Soil Sci Soc Amer Proc.* 1966, 30: 534—540.
- [14] Olsen S R, Kemper W D. *Advan Agron.* 1968, 30: 91—151.
- [15] Perkins T K, Johnston O C. *Soc Petrol Eng J.* 1963, (3): 70—84.
- [16] Passioura J B. *Soil Sci.* 1971, (111): 339—344.

THE NUMERICAL SIMULATION OF SOLUTE TRANSFER IN SATURATED AND UNSATURATED SOIL

Qiu Kejian Qi Longxi and Qin Ning

(Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080)

Abstract In the present paper, numerical simulation of solute transfer in saturated and unsaturated soil is given. The convection and dispersion terms in the equations governing water and salt motion are solved respectively by using Lagrangean moving coordinate and Eulerian fixed coordinate systems. Furthermore, cubic spline interpolation method is employed for the projection from the fixed coordinate to the moving coordinate, which makes the model more exact and simpler. The comparisons with theoretical solution in a specific case and experimental results of a soil column in laboratory verify the correctness and reliability of the model. Finally, this model is used for analysis of fresh water leaching. The numerical computation indicates that using shallow mass wells for pumping and draining, the effect of fresh water leaching for saline land reclamation can be greatly enhanced.

Key words dispersion effect, shallow mass well, fresh water leaching, solute transfer.