

# 应用山口模型反求吸附作用存在时饱和土壤的硝化速率<sup>①</sup>

任 理<sup>②</sup> 李韵珠 杨小路

(土壤和水科学系)

**摘 要** 本研究将山口(Yamaguchi,1992)等提出的反有限差分模型(inverse finite difference model)进行了扩展,推广应用于有吸附作用存在时一维饱和土柱中 $\text{NH}_4^+\text{-N}$ 的硝化作用速率的求解,并与有关试验资料和文献进行了对比。结果表明,只要注意浓度剖面取样点间距的布设和模型时、空离散步长的选取,扩展后的模型可用来估算稳态水流条件下存在吸附作用时的土壤硝化速率。

**关键词** 饱和土壤; 氮素; 运移; 吸附; 硝化速率; 有限差分; 反模型

**中图分类号** S152

## Yamaguchi's Model for an Inverse Solution of Nitrification Rate from the Nitrogen Transport Experiment in Saturated Soil Under the Existence of Adsorption

Ren Li Li Yunzhu Yang Xiaolu

(Dept. of Soil and Water Sciences)

**Abstract** The inverse finite difference model ( IFDM ) suggested by Yamaguchi et al (1992) is expanded into solving nitrogen nitrification rate in soil column leaching experiments at steady water flow. The calculated values are compared with the reference values, which are obtained from the observed data of Feng Shaoyuan et al (1995) and the parameters of Myrold et al (1986). The results show that if we take notice of selecting the distance of sampling points in measured concentration profile, and the time and space steps in calculation , this model can be used for estimating the soil nitrogen reaction rates in saturated soil, in which the adsorption of  $\text{NH}_4^+\text{-N}$  exists.

**Key words** saturated soil; nitrogen; transport; adsorption; nitrification rate; finite difference; inverse model

土壤中的 $\text{NH}_4^+\text{-N}$ 在微生物作用下转化为硝态氮的过程称之为硝化作用。在土壤氮素研究中经常涉及到由简单的质量守恒来估计硝化作用速率,但这种计算并未考虑溶质的扩

收稿日期: 1996-10-10

①得到中国博士后科学基金资助

②任理,北京圆明园西路2号中国农业大学(西校区),100094

散效应<sup>[1]</sup>。反模拟(inverse modeling)作为参数估计方法已广泛用于多孔介质流体动力学的研究中, Yeh(1986)对地下水流动模拟的反求参数问题作了较全面的评述<sup>[2]</sup>。在土壤水动力学领域, 常用数值模型检验(verify)或调试(make trial)非饱和水力传导度等参数。和通常预估-校正源汇项的作法不同, 姚建文(1989)使用土壤水数值模型反求(inverse)根系吸水项<sup>[3]</sup>。与此思路相仿, 山口等提出了一个简单且数值稳定的反有限差分模型(IFDM), 该模型基于对流-扩散原理来估计稳态水流期间土柱渗漏试验中氮素硝化作用速率的时空变化。本研究将这一反求溶质运移源汇项的新方法用于新乡(粉)砂壤土一维饱和流动条件下氮素运移与转化试验, 从另一角度求取硝化作用速率, 并与试验<sup>[4]</sup>和有关研究<sup>[5]</sup>的综合结果进行了对比和分析。

## 1 山口反模型原理概述

无机氮转化的反模型是基于如下包括一个相互作用项的经典一维溶质传输对流扩散方程(CDE)<sup>[1]</sup>:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u \frac{\partial C}{\partial Z} + D \frac{\partial^2 C}{\partial Z^2} - \Phi \quad (1)$$

这里,  $C$  是溶质浓度( $\text{mg} \cdot \text{L}^{-1}$ ),  $t$  是时间(h),  $Z$  是土壤深度(cm),  $u$  是孔隙流速( $\text{cm} \cdot \text{h}^{-1}$ ),  $D$  是水动力弥散系数( $\text{cm}^2 \cdot \text{h}^{-1}$ ),  $\Phi$  是脱溶质(solute removal)速率( $\text{mg} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$ )。

相应地, 用于脱溶质速率( $\Phi$ )的反控制微分方程简记为<sup>[1]</sup>:

$$\Phi = -u \frac{\partial C}{\partial Z} + D \frac{\partial^2 C}{\partial Z^2} - \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2)$$

从上式便知,  $\Phi$  可由实测的溶质浓度剖面通过方程(2)的有限差分格式来计算。山口等<sup>[1]</sup>(1992)通过对四种差分格式, 即: ①Crank-Nicolson 格式; ②Stone-Brian 格式; ③向前时间中心空间(FTCS)格式; ④运动浓度斜率(MCS)格式的数值试验。表明: Crank-Nicolson 格式最适于反模型的数值计算, 特别是在大的  $\Phi/u$  或  $\Phi/D$  的情况下, 它是数值最稳定的。

均质土壤稳态水流条件下, 方程(2)的 Crank-Nicolson 差分离散为<sup>[1]</sup>:

$$\begin{aligned} \Phi_z^{t+\Delta t/2} = & -\frac{C_z^{t+\Delta t} - C_z^t}{\Delta t} - u \cdot \frac{1}{2} \left( \frac{C_{z+\Delta z}^{t+\Delta t} - C_{z-\Delta z}^{t+\Delta t}}{2\Delta Z} + \frac{C_{z+\Delta z}^t - C_{z-\Delta z}^t}{2\Delta Z} \right) \\ & + D \cdot \frac{1}{2} \left( \frac{C_{z+\Delta z}^{t+\Delta t} - 2C_z^{t+\Delta t} + C_{z-\Delta z}^{t+\Delta t}}{(\Delta Z)^2} + \frac{C_{z+\Delta z}^t - 2C_z^t + C_{z-\Delta z}^t}{(\Delta Z)^2} \right) \end{aligned} \quad (3)$$

即

$$\begin{aligned} \Phi_z = & -\frac{C_z^{t+\Delta t/2} - C_z^{t-\Delta t/2}}{\Delta t} - u \cdot \frac{1}{2} \cdot \left( \frac{C_{z+\Delta z}^{t+\Delta t/2} - C_{z-\Delta z}^{t+\Delta t/2}}{2\Delta Z} + \frac{C_{z+\Delta z}^{t-\Delta t/2} - C_{z-\Delta z}^{t-\Delta t/2}}{2\Delta Z} \right) \\ & + D \cdot \frac{1}{2} \cdot \left( \frac{C_{z+\Delta z}^{t+\Delta t/2} - 2C_z^{t+\Delta t/2} + C_{z-\Delta z}^{t+\Delta t/2}}{(\Delta Z)^2} + \frac{C_{z+\Delta z}^{t-\Delta t/2} - 2C_z^{t-\Delta t/2} + C_{z-\Delta z}^{t-\Delta t/2}}{(\Delta Z)^2} \right) \end{aligned} \quad (4)$$

式中  $\Delta t$  和  $\Delta Z$  分别为时间步长(h)和空间步长(cm)。

考虑方程(1)和如下定解条件所构成的数学模型,并假定  $\Phi = K_1 C$  ( $K_1$  为一级相互作用速率系数,  $h^{-1}$ ),

$$\begin{aligned} C &= C_i & t &= 0 & Z > 0 \\ C &= C_s & t &\geq 0 & Z = 0 \\ C &= 0 & t &\geq 0 & Z \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (5)$$

其解析解为<sup>[1]</sup>:

$$\begin{aligned} C(Z, t) &= \frac{C_i}{2} \left\{ \exp \frac{(1-A)uZ}{2D} \operatorname{erfc} \frac{Z - Aut}{2\sqrt{Dt}} + \exp \frac{(1+A)uZ}{2D} \operatorname{erfc} \frac{Z + Aut}{2\sqrt{Dt}} \right\} \\ &+ \frac{C_i}{2} \exp(-k_1 t) \left\{ \operatorname{erfc} \frac{ut - Z}{2\sqrt{Dt}} - \exp \frac{uZ}{D} \operatorname{erfc} \frac{ut + Z}{2\sqrt{Dt}} \right\} \end{aligned} \quad (6)$$

这里

$$A = \left( 1 + \frac{4Dk_1}{u^2} \right)^{0.5}$$

相应的关于  $\Phi(Z, t)$ , 反解析解(inverse analytical solution)为:

$$\Phi_{ANA}(Z, t) = k_1 \cdot C(Z, t) \quad (7)$$

山口等(1992)通过与方程(7)对比所进行的数值试验表明,无论水流速度快慢还是反应速率大小,为定量地避免重要的误差( $\Phi$  值误差大于 1%)应该满足如下准则<sup>[1]</sup>:

$$\begin{aligned} \Delta Z &\leq 1 \\ \frac{\Delta t}{\Delta Z} &\leq 0.5 \end{aligned} \quad (8)$$

式中  $\Delta t$  的单位是 h,  $\Delta Z$  的单位是 cm。值得注意的是,与 CDE 常用的有限差分解不同, IFDM 在给定时间步长的计算结果完全独立于以前时间步长的计算结果。因此,误差不会累积,且 1% 的误差在大多数情况下是可以接受的<sup>[1]</sup>。

长久以来,土壤渗流计算中不采用如此简单的反模型来反求溶质运移的相互作用项,是因为不可能导出 IFDM 固有数值误差的解析方程,且土壤水溶质运移的逆问题又是不适定的,因而难以保证反模型的计算精度和数值稳定性。山口等人的数值试验特别是所得到的模型离散的约束条件(方程(8)),使我们得以用简捷的数模来估算溶质传输的源汇项。

由(8)式可知,为满足反模型的精度,对于  $\Delta Z$  与  $\Delta t$  有严格的限制,而实测资料的取样间隔往往难以达到这个要求。因此,必须考虑实测数据间的插值问题。此外,土壤质地和温度对硝化作用速率也有一定影响,对此文献[1]均给出了详细的讨论。

## 2 实例检验

冯绍元等(1995)在室内进行了稳态水流条件下氮肥( $\text{NH}_4\text{HCO}_3$ )在一维饱和土柱中的渗漏试验,供试土样为河南新乡(粉)砂壤土。取样点分别布设在距土柱表面 3.5, 5.5, 8.5, 18 cm 处,试验的过程和有关结果详见文献[4]。由于该试验中吸附作用必须考虑,故本文在计算时扩展山口模型,即在原模型的时变项前乘以阻滞系数  $R_d$ 。用于计算的土壤剖面溶质浓度数据列于表 1,其中的非实测数据无论沿土壤剖面方向还是沿时间推进方向均采用线性插值得得。反模型所用参数  $R_d, u$  和  $D$  取自文献[4]。

表 1 土柱剖面  $\text{NH}_4^+\text{-N}$  浓度时空变化

| t/h    | Z /cm |       |       |       |       |       |       |       |
|--------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
|        | 3.5*  | 4.5   | 5.5*  | 6.5   | 7.5   | 8.5*  | 9.5   | 18*   |
| 167#   | 251.7 | 278.0 | 304.3 | 332.9 | 361.5 | 390.1 | 409.2 | 571.5 |
| 190.75 |       | 177.5 | 200.5 | 204.5 | 208.5 | 212.5 | 235.0 |       |
| 191#   | 153.4 | 176.4 | 199.4 | 203.1 | 206.9 | 210.6 | 233.2 | 425.3 |
| 191.25 |       | 176.3 | 199.2 | 202.9 | 206.7 | 210.4 | 232.8 |       |
| 214.75 |       | 162.5 | 177.5 | 182.8 | 188.0 | 193.3 | 196.4 |       |
| 215#   | 147.4 | 162.4 | 177.3 | 182.6 | 187.8 | 193.1 | 196.0 | 221.0 |
| 215.25 |       | 162.0 | 177.1 | 182.4 | 187.6 | 192.9 | 195.8 |       |
| 238.75 |       | 133.2 | 158.3 | 163.9 | 169.5 | 175.1 | 177.4 |       |
| 239#   | 107.6 | 132.9 | 158.1 | 163.7 | 169.3 | 174.9 | 177.2 | 196.4 |
| 239.25 |       | 132.7 | 157.9 | 163.5 | 169.1 | 174.8 | 177.0 |       |
| 286.75 |       | 105.5 | 128.0 | 134.1 | 140.2 | 146.3 | 148.7 |       |
| 287#   | 82.9  | 105.4 | 127.8 | 133.9 | 140.1 | 146.2 | 148.6 | 168.7 |
| 287.25 |       | 105.3 | 127.7 | 133.8 | 139.9 | 146.1 | 148.4 |       |
| 334.75 |       | 94.3  | 111.1 | 114.0 | 117.0 | 119.9 | 123.8 |       |
| 335#   | 68.6  | 94.2  | 111.0 | 113.9 | 116.9 | 119.8 | 123.6 | 156.1 |
| 335.25 |       | 94.0  | 110.8 | 113.8 | 116.8 | 119.8 | 123.6 |       |
| 358.75 |       | 77.4  | 92.6  | 100.8 | 109.1 | 117.3 | 120.6 |       |
| 359#   | 62.1  | 77.3  | 92.4  | 100.7 | 109.0 | 117.3 | 120.6 | 148.4 |
| 359.25 |       | 77.2  | 92.4  | 100.6 | 108.9 | 117.2 | 120.5 |       |
| 383#   | 57.8  | 72.9  | 87.9  | 94.4  | 100.8 | 107.3 | 111.2 | 144.1 |

\* 实测点埋深; # 取样时刻

反模型在  $Z=5.5$  cm 和  $Z=8.5$  cm 处  $\text{NH}_4^+\text{-N}$  硝化作用速率的数值计算结果与相应深度处实测浓度值(冯绍元等,1995)和砂壤土的  $\text{NH}_4^+\text{-N}$  硝化作用一级速率常数上、下限(Myrold 等,1986)之乘积(本文称之为“参考值范围”)进行了对比(表 2),可见计算精度后者较前者提高,这可能是由于在  $Z=5.5$  cm 处周围取样孔布设较近,干扰了取样点周围的流场,从而影响浓度动态的观测精度。当然影响逆问题估算源汇项精度的原因是复杂的,本

文数值试验表明:阻滞系数、孔隙流速和水动力弥散系数是三个最重要的因素。此外,作者调约束条件(8),即  $\Delta t$  和  $\Delta Z$  分别取为 0.1 h 和 0.5 cm,进行了反模型计算,发现对结果影响不大。

表 2 土柱剖面  $\text{NH}_4^+\text{-N}$  硝化作用速率随时间的变化

| 取样时间<br>$t/h$ | 计算值(IFDM)<br>( $Z=5.5\text{ cm}$ ) | 参考值范围        | 计算值(IFDM)<br>( $Z=8.5\text{ cm}$ ) | 参考值范围        |
|---------------|------------------------------------|--------------|------------------------------------|--------------|
| 191           | 24.150                             | 9.388~13.709 | 45.369                             | 9.916~14.479 |
| 215           | 4.485                              | 8.348~12.189 | 6.843                              | 9.092~13.276 |
| 239           | -0.869                             | 7.444~10.869 | 6.050                              | 8.235~12.024 |
| 287           | -2.819                             | 6.017~8.786  | 4.535                              | 6.884~10.051 |
| 335           | 0.633                              | 5.226~7.631  | 2.331                              | 5.641~8.236  |
| 359           | -0.799                             | 4.351~6.353  | -0.242                             | 5.523~8.064  |

注:计算值和参考值范围的单位为  $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$

### 3 结语

时至今日,尚无直接的方法来测定稳定水流条件下土壤不同深度处铵态氮硝化速率随时间的变化过程。因此,IFDM 不能通过室内或田间试验值来证实<sup>[1]</sup>,而只能间接的验证。

本文通过山口模型的推广应用表明,只要满足:①溶质输运可用 CDE 描述;②土壤剖面是均质的;③能够精确测定和计算参数  $Rd, u$  和  $D$ ;④计算中满足时、空步长的约束条件(方程(8));⑤取样孔间距不宜过密,且根据实测的溶质浓度剖面注意插值方法的选取,则扩展后的反模型可用于稳定快速入渗条件下吸附作用存在时土壤铵态氮硝化速率的估算。

### 参 考 文 献

- 1 Yamaguchi, Moldrup T P, Rolston D E, Hansen J Aa. A simple, inverse model for estimating nitrogen reaction rates from soil column leaching experiments at steady water flow. *Soil Sci*, 1992,154:490~496
- 2 Yeh W W G. Review of parameter identification procedures in groundwater hydrology. *The inverse problem*. *Water Resour Res*, 1986,22:95~108
- 3 姚建文. 作物生长条件下土壤含水量预测的数学模型. *水利学报*, 1989(9):32~38
- 4 冯绍元,张瑜芳,沈荣开. 排水条件下饱和土中氮肥转化与运移模拟. *水利学报*, 1995(6):16~22
- 5 Myrold D D, Tiedje J M. Simultaneous estimation of several nitrogen cycle rates using  $^{15}\text{N}$  theory and application. *Soil Biol Biochem*, 1986,18(6):559~568
- 6 Moldrup T P, Yamaguchi, Hansen J Aa, Rolston D E. An accurate and numerically stable model for one-dimensional solute transport in soils. *Soil Sci*, 1992,153:261~273
- 7 Yamaguchi, Moldrup T P, Yokosi S. Using breakthrough curves for parameter estimation in the convection-dispersion model of solute transport. *Soil Sci Soc Am J*, 1989,53:1 635~1 641
- 8 Yamaguchi, Moldrup T P, Teranishi S, Rolston D E. Denitrification in porous media during rapid, continuous leaching of synthetic wastewater at saturated water flow. *J Environ Qual*, 1990,19:676~683