

DOI: 10.13758/j.cnki.tr.2022.02.002

高震国, 钟瑞林, 杨帅, 等. Hydrus 模型在中国的最新研究与应用进展. 土壤, 2022, 54(2): 219–231.

# Hydrus 模型在中国的最新研究与应用进展<sup>①</sup>

高震国<sup>1</sup>, 钟瑞林<sup>2</sup>, 杨帅<sup>1</sup>, 李小港<sup>1</sup>, 杨晓英<sup>1\*</sup>

(1 复旦大学环境科学与工程系, 上海 200438; 2 赣州稀土集团有限公司, 江西赣州 341000)

**摘要:** 美国国家盐土实验室开发的 Hydrus 模型主要用于模拟包气带中水、溶质和热运移过程, 目前在世界各地得到广泛应用。本文筛选了 CNKI 和 Web of Science 数据库收录的 2017—2020 年间中国学者发表的 347 篇以 Hydrus 为主题的研究论文, 系统分析我国在 Hydrus 模型领域的研究进展。结果表明 Hydrus 能够较好地模拟不同介质中水与溶质的迁移转化过程。然而, 目前我国的 Hydrus 应用研究大都局限于小区域或对室内土柱的一维模拟; 研究中确定模型水力和溶质运移参数的过程有待规范与提高; 部分研究缺乏对 Hydrus 模拟结果的系统评估。未来我国 Hydrus 模型研究有待加强的领域包括: ①将 Hydrus 与不同环境领域模型进行耦合从而实现流域等大尺度的全过程模拟; ②基于实际研究需求, 对 Hydrus 标准模块缺乏的功能进行扩展。

**关键词:** Hydrus; 包气带; 水分运移; 溶质运移; 模拟

**中图分类号:** X53 **文献标志码:** A

## Recent Progresses in Research and Applications of Hydrus Model in China

GAO Zhenguo<sup>1</sup>, ZHONG Ruilin<sup>2</sup>, YANG Shuai<sup>1</sup>, LI Xiaogang<sup>1</sup>, YANG Xiaoying<sup>1\*</sup>

(1 Department of Environmental Science and Engineering, Fudan University, Shanghai 200438, China; 2 Ganzhou Rare Earth Group Co., Ltd., Ganzhou, Jiangxi 341000, China)

**Abstract:** The Hydrus model, developed by the U.S. Salinity Laboratory, is mainly designed to simulate the transport of water, solutes and heat in the vadose zone, and currently, it has been used widely all over the world. In this paper, we systematically analyzed the progresses of Hydrus model researches in China based on screening 347 literatures from the CNKI and Web of Science databases, and these papers were published by Chinese scholars from 2017 to 2020. The results showed that Hydrus could well simulate the transport and transformation processes of water and solutes in different media. However, current application of Hydrus in China has been mostly limited to the one-dimensional simulation of small areas or indoor soil columns. In addition, the processes of calibrating the hydraulic and solute transport parameters needed to be further standardized and improved, while some studies lacked the systematic evaluation of Hydrus simulation results. It was suggested that future research on Hydrus models in China should be strengthened in two aspects: Firstly, Hydrus could be coupled with different environmental domain models to achieve the simulation of the whole process at a large scale such as cross a river basin; Secondly, the standard modules of Hydrus could be extended to add new functions to meet the real-world research needs.

**Key words:** Hydrus; Vadose zone; Water transport; Solute transport; Simulation

地表以下潜水面以上的土壤称为包气带。包气带是水文循环的重要组成部分, 对降雨入渗、土壤水分运移、蒸发、植物水分吸收、地下水补给、径流、侵蚀等过程都有着显著的影响<sup>[1]</sup>。近年来, 由于农业、工业、城市废弃物处置等人类活动对地下环境造成的严重污染, 水和溶质在包气带中的迁移转化过程研究成为国内外学者关注的焦点<sup>[2-4]</sup>。

在过去数十年, 国内外对包气带水分和溶质运移过程的研究不断深入, 在过程分析和数学描述方面都取得了长足的进步, 并涌现出如 SWAP、SWAT、LEACHM、Hydrus 等多种用于预测水和溶质在地表与地下水水位之间运移的理论概化和数值模拟模型<sup>[5-8]</sup>。

其中, 美国国家盐土实验室 (U.S. Salinity Laboratory) 开发的 Hydrus 模型近年来应用较为广泛,

①基金项目: 国家重点研发计划项目(2019YFC1805100)资助。

\* 通讯作者(xiaoying@fudan.edu.cn)

作者简介: 高震国(1997—), 男, 安徽滁州人, 硕士研究生, 主要研究方向为污染物行为研究与运移模拟。E-mail: 19210740070@fudan.edu.cn

该模型具有以下特点: ①基于有限元法求解 Richard 水分运移方程和溶质对流-弥散方程, 适用于不同复杂程度的一维、二维、三维系统的水、溶质和热运移过程模拟; ②其水流方程涵盖根系吸水过程, 并可考虑双孔隙型(部分孔隙水可流动, 部分孔隙水不可流动)和双渗透型(部分孔隙水流动相对较快, 部分孔隙水流动相对较慢)水流运动方式; ③其热传输方程包含热传导和对流, 并可考虑水、蒸汽和能量的耦合传输过程; ④其溶质运移方程涵盖多种固-液相间的非线性、非平衡反应过程和液-气相间的线性平衡反应过程, 并包括用于模拟溶质间发生顺序连锁反应的一级溶质生成和衰减过程, 因此可用于对氮素、重金属、核素、农药、激素、胶体、细菌等多种不同性质溶质的运移过程模拟<sup>[1, 9]</sup>。

自 2000 年以来, 我国学者在农业灌溉<sup>[10]</sup>、水土保持<sup>[11]</sup>、污染评估<sup>[12]</sup>和污水处理<sup>[13]</sup>等领域对 Hydrus 进行了广泛的研究。然而, 迄今为止, 对于 Hydrus 模型在我国不同环境领域的应用缺乏系统的总结、评价与分析, 已有的为数不多的 Hydrus 模型应用综述只局限于土壤灌溉和盐土改良等某一应用领域<sup>[14]</sup>。为丰富模型的研究与应用, 本文以 Hydrus 为主题词, 检索和筛选了中国知网(以下简称 CNKI)和 Web of Science(以下简称 WoS)数据库收录的 2017—2020 年间中国学者发表的 347 篇有关 Hydrus 模型应用的学术期刊论文, 综合评估 Hydrus 模型在不同环境领域中对水分、溶质等运移过程的模拟性能, 系统分析 Hydrus 模型在我国各环境领域的应用进展与局限, 聚焦 Hydrus 模型当今应用的热点和未来发展趋势, 为促进 Hydrus 模型在我国环境领域进一步的应用与发展提供有力的支持。

## 1 Hydrus 模型

### 1.1 Hydrus 模型发展过程

Hydrus 模型的发展最初可以追溯到 Van Genuchten<sup>[15-16]</sup>建立的 SUMATRA 和 WORM 模型、Vogel<sup>[17]</sup>建立的 SWMI 模型以及 Kool 和 van Genuchten<sup>[18]</sup>建立的旧版 Hydrus 模型。其中, SUMATRA 中使用 Hermitian cubic 有限元数值格式, WORM 和旧版 Hydrus 代码中使用线性有限元来求解水流和溶质运移方程, 而 SWMI 则使用有限差分来求解流动方程。1998 年 Simunek<sup>[19]</sup>发布基于 Windows 的第一版 Hydrus 1D 模型, 后经多个版本更新和系列发展, Hydrus 逐渐演变成为一款可以用于模拟水分、溶质、热、二氧化碳、病毒、细菌等在土壤介质中迁

移和转化过程的模型工具。

Hydrus 模型系列中的 Hydrus 1D 模型包括水分运移(water flow)、热和溶质运移(heat and solute transport)、根系吸水(root water uptake)、剖面信息(soil profile)设置、模拟结果后处理、参数反演(inverse solution)等模块<sup>[1, 9, 20]</sup>, 可用于模拟一维变饱和条件下的地下水流、根系吸水、溶质运移和热运移等过程。由于 Hydrus 1D 属于开放性软件, 可以从 Hydrus 模型官网([www.pc-progress.com](http://www.pc-progress.com))上免费下载使用<sup>[21]</sup>, 其在世界各地的应用尤为广泛<sup>[12, 22-26]</sup>。

与 Hydrus 1D 模型相比, Hydrus 2D/3D 支持模拟更加复杂的二维和三维对象, 可以用于模拟二维垂直或水平面、轴对称三维区域或完全三维变饱和区域的水流、溶质和热传输。除了内置算法和初始条件不同以外, Hydrus 2D/3D 模型的模拟功能也更为强大。例如, 其增加了模拟人工湿地(constructed wetlands)和边坡稳定性(slope stability)的模块、熏剂(fumigant)运移选项、允许对灌溉方式设定和溶质反应参数随土壤水分含量变化等功能, 这些新功能使得 Hydrus 2D/3D 模型适用于更多的模拟场景<sup>[9, 27-28]</sup>。

### 1.2 Hydrus 模型原理

**1.2.1 水分运移模拟** 外界环境中的水通过降雨下渗等方式进入土壤, 在土壤中被生物利用或吸收, 剩余的水分通过蒸发、内部运移等方式离开土壤<sup>[29]</sup>。自 1856 年达西定律问世以来, 土壤水分运移的研究已有百余年的历史, 目前基于达西定律推导得到的 Richards 方程是研究土壤水分运动的基本方程。

水分运移模拟是 Hydrus 中最为基础的模拟模块。Hydrus 假设空气在水分流动过程中的作用并不明显, 利用修正的 Richards 方程描述饱和与非饱和带的水流运动<sup>[1]</sup>:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ K \left( K_{ij}^A \frac{\partial h}{\partial x_j} + K_{iz}^A \right) \right] - S \quad (1)$$

式中:  $\theta$  为体积含水量( $\text{cm}^3/\text{cm}^3$ );  $h$  为压头( $\text{cm}$ );  $K$  为饱和导水率( $\text{cm/d}$ );  $K_{ij}^A$  为无量纲张量  $K^A$  的第  $i$  个主分量在  $j$  方向上的分量; 源汇项  $S(\text{d}^{-1})$  用于解释根系吸水。 $\theta$ 、 $h$ 、 $K$  3 个水力参数与土壤水分保持曲线相关, 可通过压力膜仪法<sup>[30]</sup>、负压计法<sup>[31]</sup>、离心法<sup>[32]</sup>等实验方法测量得出的土壤脱湿或吸湿数据进行拟合获得<sup>[33-37]</sup>。

**1.2.2 根系吸水** 根系吸水是土壤水分运移的重要组成部分, 式 1 中源汇项  $S$  即代表根系吸水。Hydrus 使用 3 类模型解释根系吸水过程: ①吸水削减模型

(water uptake reduction model)使用 Feddes 水分胁迫响应函数或  $S$  型函数将根系潜在吸水率降低为实际吸水率;②溶质压力模型(solute stress model)可增加盐分胁迫对根系吸水量的影响;③主动溶质吸收模型(active solute uptake model)充分考虑主动和被动两种根部养分吸收。

以吸水削减模型中最常用的 Feddes 函数为例<sup>[38-39]</sup>, 它将源汇项  $S$  定义为:

$$S(h, h_\phi) = \alpha(h, h_\phi) S_p \quad (2)$$

式中:  $h_\phi$  为渗透水头(cm), 这里假设它是所有溶质浓度的线性组合;  $\alpha(h)$  为根系吸水胁迫响应函数;  $S_p$  为潜在吸水率( $d^{-1}$ )。

Hydrus 通过根系吸水参数、根系分布参数和根系生长参数来控制整个根系吸水模拟过程。除了基于实验测定根系吸水参数取值以外, Hydrus 还提供分别适用于 Feddes 水分胁迫响应函数和盐分胁迫函数的参数数据库。

**1.2.3 蒸散发量** Hydrus 模型基于气象数据使用 Penman-Monteith(以下简称 PM)公式或 Hargreaves 方程<sup>[40]</sup>计算潜在蒸散发通量。此外, 蒸散发通量还与根系吸水模块输入的植物参数相关。

PM 公式如式(3)所示:

$$ET_0 = \frac{1}{\lambda} \left[ \frac{\Delta(R_n - G)}{\Delta + \gamma(1 + r_c/r_a)} + \frac{\rho C_p(e_a - e_d)/r_a}{\Delta + \gamma(1 + r_c/r_a)} \right] \quad (3)$$

式中:  $ET_0$  为蒸散发量(mm/d);  $\lambda$  为汽化潜热(MJ/kg);  $R_n$  为地面净辐射(MJ/( $m^2 \cdot d$ ));  $G$  为热通量(MJ/( $m^2 \cdot d$ ));  $\rho$  为空气密度( $kg/m^3$ );  $C_p$  为湿空气的比热(1.013 kJ/( $kg \cdot ^\circ C$ ));  $e_a$  为温度  $T$  下蒸汽压(kPa);  $e_d$  为实际蒸汽压(kPa);  $r_c$  为作物树冠阻力(s/m);  $r_a$  为空气动力阻力(s/m);  $\gamma$  为湿度计常数(kPa/ $^\circ C$ )。

Hargreaves 方程如式(4)所示:

$$ET_p = 0.0023 R_a (T_m + 17.8) \sqrt{TR} \quad (4)$$

式中:  $ET_p$  为蒸散发量(mm/d);  $R_a$  为与外空辐射等价的水量(mm/d);  $T_m$  为日平均气温( $^\circ C$ );  $TR$  是日最高与最低温度差( $^\circ C$ )。

**1.2.4 溶质运移** 土壤溶质运移旨在研究各种有机、无机溶质在土壤中迁移转化的过程、机理和规律<sup>[41]</sup>。20 世纪 60 年代 Nielson 和 Bigga 建立的对流-弥散 CDE 方程<sup>[15-16]</sup>是目前研究土壤溶质运移过程的基本方程。Hydrus 基于对流-弥散方程来模拟溶质在包气带中的迁移转化过程, 忽略气态影响, 其一般形式如下:

$$\frac{\partial(\theta C + \rho_b S)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial(q_i C)}{\partial x_i} - W C_r + G \quad (5)$$

式中:  $\theta$  为体积含水量( $cm^3/cm^3$ );  $C$  为溶质液态浓度(g/L);  $\rho_b$  为土壤容重( $g/cm^3$ );  $S$  为溶质吸附态浓度(g/g);  $q_i$  为水流通量( $cm/h$ );  $D_{ij}$  为弥散系数( $cm^2/h$ );  $W$  为水流方程中的汇项;  $C_r$  为汇项中的浓度( $g/cm^3$ );  $G$  为零阶、一阶反应汇项, 包含了零阶生成、一阶降解以及一阶衰变/生成反应等。

此外, Hydrus 允许包气带中的溶质在其液态和吸附态间存在非平衡的相互作用, 并利用广义非线性方程来描述溶质的吸附等温线:

$$S = \frac{k_s C^\beta}{1 + \eta C^\beta} \quad (6)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{k_s \beta C^{\beta-1}}{(1 + \eta C^\beta)^2} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{C^\beta}{1 + \eta C^\beta} \frac{\partial k_s}{\partial t} - \frac{k_s C^{2\beta}}{(1 + \eta C^\beta)^2} \frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{k_s C^\beta \ln C}{(1 + \eta C^\beta)^2} \frac{\partial \beta}{\partial t} \quad (7)$$

式中:  $k$  为线性吸附常数;  $\beta$ 、 $\eta$  为经验系数;  $t$  为时间。

**1.2.5 土壤温度和热运移** 水和溶质在土壤介质中的迁移转化速率均受土壤温度的控制, 忽略水蒸气扩散的影响, 土壤中的热传导方程可以表示为<sup>[42]</sup>:

$$C(\theta) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \lambda_{ij}(\theta) \frac{\partial T}{\partial x_j} \right] - C_w q_i \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (8)$$

式中:  $T$  为温度(K),  $\lambda_{ij}(\theta)$  为土壤的表观导热系数(W/( $m \cdot K$ ));  $q_i$  为水流通量( $cm/h$ );  $C(\theta)$  和  $C_w$  分别为多孔介质和液相的体积热容(J/( $m^3 \cdot K$ ))。

### 1.3 Hydrus 参数反演

根据模拟过程不同, 建立 Hydrus 模型需要确定土壤水力、溶质运移、溶质反应、热运移等多种参数的取值。基于 Marquardt-Levenberg 参数优化算法, Hydrus 允许基于瞬态或稳态现场监测数据对不同参数取值进行反演, 但其无法对根系吸水相关参数进行反演, 实现这一功能需要修改模型源代码或者使用外部拓展工具<sup>[21]</sup>。

反演过程通过选择一个与目标参数有关的函数来衡量实际监测数据与模拟数据之间的一致性, 并通过最小化目标函数得到最优拟合参数<sup>[21]</sup>。Marquardt-Levenberg 是一种局部梯度优化算法, 对于每个反演参数, 需要设定其初始值和梯度取值范围, 从而计算出在该梯度范围内的目标函数最小值。因此, Hydrus 建议使用不同的初始值和梯度范围进行重复计算, 从而能够在全值范围内选出使得目标函数取值最小的参数。

## 2 我国 Hydrus 模型应用现状与分析

将在 CNKI 和 WoS 数据库中以 Hydrus 为主题词检索得到的 347 篇 2017—2020 年间第一作者或通讯作者为中国学者的期刊论文,按 Hydrus 模拟对象和研究内容进行分类,结果如图 1 所示。土壤水分模拟是目前 Hydrus 应用最为广泛的领域,其中 CNKI 包含 105 篇论文, WoS 包含 107 篇论文,共计 212 篇。除水分模拟外, Hydrus 还应用于对多种溶质在不同多孔介质中的运移模拟,主要包括水盐、重金属、有机物和氮,其中水盐和氮循环过程模拟论文数量较

多,分别为 41 篇和 35 篇;重金属和有机物运移过程模拟研究较少,分别为 13 篇和 11 篇。此外,有 8 篇论文将 Hydrus 应用于热运移模拟,剩余的 27 篇论文主要涉及 Hydrus 模型的综合应用以及模型的功能扩展与改进。根据文献检索结果,本文以下重点分析总结我国学者应用 Hydrus 模型开展水分和不同溶质(水盐、氮、重金属、有机物)运移过程模拟的研究现状。此外,本文还就 Hydrus 在热运移模拟、污水处理系统模拟、多模型耦合等方面的应用加以介绍,以较为完整地反映 Hydrus 在我国的应用与发展现状。

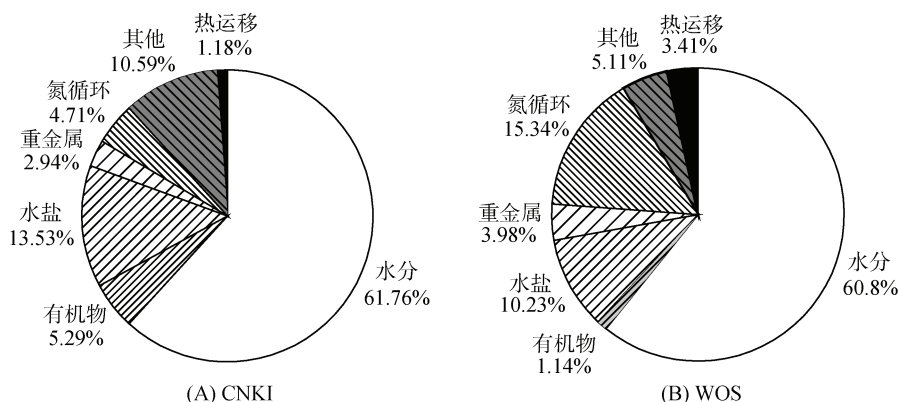


图 1 中国学者 Hydrus 论文研究领域分布(2017—2020 年)

Fig. 1 Research field distribution of Hydrus papers by Chinese researchers(2017—2020)

### 2.1 水分模拟

**2.1.1 土壤水平衡** 土壤水分含量关系到植物能否正常生长。Hydrus 能够模拟包括降雨带来的水分输入、植物蒸腾、地表蒸散发以及土壤水下渗在内的土壤水分平衡过程,在水土保持、生态修复等领域有广泛应用。近年来有学者使用 Hydrus 模拟黄土高原等干旱或极端干旱条件下的土壤水分平衡,研究发现绝大多数降水都通过蒸散发方式流失<sup>[22,43]</sup>,但不同的种植措施下地表蒸腾作用差异大,可以达到不同的保水效果。例如种植苜蓿时土壤表面蒸腾量对气候响应较强,土壤水分流失大于补给<sup>[43]</sup>,而在天然草地下地表蒸腾量对气候响应较弱,土壤水分能够达到平衡<sup>[44]</sup>。除地表蒸散发外,深层渗漏也是干旱地区水分流失的重要方式之一,有研究发现长时间低强度的降雨有利于更深层的下渗<sup>[45]</sup>。

**2.1.2 农业灌溉** 在不同的气候与土壤条件下种植不同作物需要因地制宜采取适宜的作物种植措施。灌溉措施是影响作物产量的重要因素之一,尽管在实际农业生产中,可通过大田试验确定适应的灌溉方案,但其耗时耗力且试验结果易受天气变化影响。由

于 Hydrus 能模拟不同时空尺度和灌溉条件下的土壤水分变化<sup>[46]</sup>,可用于评估在不同环境条件下多种灌溉措施的供水效率。例如:在西北干旱地区, Hydrus 被用于分析 128 种灌溉情景下的深层渗漏和水分胁迫情况,并进一步结合灌溉方案寻优函数来确定最佳灌溉方案<sup>[47]</sup>。

除进行野外模拟外,部分研究建立 Hydrus 模型模拟不同室内试验过程。例如:徐俊增等<sup>[48]</sup>基于盆栽试验结果建立 Hydrus 1D 模型,定量分析黑土区土壤含水率与饱和土壤埋深的动态关系。此外,一些学者基于土柱/土箱试验数据建立 Hydrus 模型,模拟灌溉过程中入渗量和湿润体形状与半径之间的关系<sup>[49]</sup>、不同灌溉措施的灌溉效果<sup>[10]</sup>,以及不同土壤性质和负压灌溉条件下的土壤水分变化<sup>[50]</sup>。

最后, Hydrus 将滴灌器设为点源或等效线源,因而较适于模拟滴灌系统中的土壤水分变化情况<sup>[51-52]</sup>,近年来国内也有相关应用。例如:高金花等<sup>[53]</sup>使用 Hydrus 1D 模型作为田间滴灌试验的补充,研究 60 cm 深的盐碱土区域内土壤含水量变化。李豆豆等<sup>[54]</sup>使用 Hydrus 2D/3D 模型替代田间试验以

确定优化的滴灌参数和模式。

## 2.2 溶质运移模拟

自然或人类活动产生的各种溶质一旦进入土壤环境中,一般要同时进行大量的物理、化学和生物过程,包括吸附-解吸、挥发、生物降解以及动力学等过程。Hydrus 多样的溶质方程使得其能够模拟性质各异的溶质在包气带的迁移转化过程,并均能取得较好的模拟效果。

**2.2.1 水盐** 土壤盐分是植物正常生长的必要条件,其运移过程与土壤水分密切相关<sup>[55-57]</sup>。由于常见盐分的赋存形态较为稳定,使用 Hydrus 模拟水盐运移时通常只需要确定溶质随水分进行运移的参数而不需要确定其反应参数。近年来我国学者借助 Hydrus 模拟土壤水盐变化的研究较多,例如模拟分析滴灌、暗管排水等节水灌溉技术下土壤的水盐动态,比选最优灌溉方案<sup>[53,58]</sup>;预测分析土壤盐碱化进程,为制定灌溉策略和土壤修复提供基础<sup>[11]</sup>;将 Hydrus 与农作物生长联系起来以预测不同水盐条件下农作物产量<sup>[59]</sup>等。此外,姚荣江等<sup>[60]</sup>利用多源数据和机理模型进行生态模拟,发现 EnKF 同化算法可有效提升 Hydrus 的水盐模拟效果。

**2.2.2 氮循环** 在农业、环境、工业等领域,氮循环一直是广大学者关注的焦点。与其他溶质相比,氮素的迁移转化过程较为特殊,氮素可以以不同的形态赋存,其反应过程也各异。例如,铵态氮既可以与土壤粒子发生吸附反应被土壤截留,也可以挥发成为气态,还可以沿硝化反应链转化成硝态氮;而硝态氮既可以随土壤水流动传输,也可以发生反硝化反应转化为气态氮气。

作为一种普适性溶质运移模拟模型,Hydrus 不提供内置的氮循环模拟概念框架。已有的 Hydrus 氮素研究大都根据具体的模拟需求,选取关键的一种或多种氮素的运移过程进行模拟。目前 Hydrus 对氮素迁移转化过程的模拟主要集中于铵态氮吸附过程、硝化与反硝化过程,而对有机氮的矿化过程、碳源对氮循环过程的影响、植物的氮吸收等过程的研究涉及较少。尹芝华等<sup>[61]</sup>在模拟污水泄露事件时仅考虑硝化和反硝化过程,其从历史文献中获取氮反应过程参数值并通过模型反演进行优化,该研究结果表明由于吸附作用氨氮在土壤表层出现累积,而硝态氮更容易迁移,是下伏含水层和下游河流污染的主要来源。杨红薇等<sup>[13]</sup>在研究人工快渗系统时重点考虑铵态氮在土壤中的吸附和硝化过程,其通过吸附试验确定吸附系数,从文献中获取铵态氮在微生物作用下的硝化反应

速率,该研究结果表明:所建 Hydrus 1D 模型能够较好地模拟不同运行条件和填料层厚度下铵态氮在系统中的迁移转化过程。Pan 等<sup>[62]</sup>重点研究地下渗滤系统中的反硝化过程,其从文献中获取反硝化速率常数并校正,利用所建模型研究不同水力条件和温度对反硝化过程的影响并建立经验公式。Hou 等<sup>[63]</sup>基于 Hydrus 模型分析施肥对土壤氮动态的影响,该研究重点考虑铵态氮在土壤中的吸附和运移,并发现化学非平衡模型为最优模拟模型。此外该研究的基于土柱试验进行敏感性分析的结果显示水土分配系数( $K_d$ )是影响铵态氮运移过程最为关键的参数。

**2.2.3 重金属** 土壤中的重金属种类繁多,赋存形态复杂,能够在土壤环境中长期稳定存在,其引发的生态环境效应是世界许多国家面临的环境污染治理难题<sup>[64]</sup>。吸附作用是土壤截留重金属的主要过程之一,考虑到土壤水分流动和吸附反应的复杂性,Hydrus 提供多种物理/化学非平衡吸附模式用于模拟重金属在土壤中的吸附和运移过程。

选取合适的重金属运移模式并确定相应的运移参数是运用 Hydrus 模拟重金属运移过程的关键。在已有研究中,确定不同重金属运移参数取值的方式主要包括实验测定<sup>[65]</sup>、文献查阅<sup>[66]</sup>和模型反演等<sup>[67-68]</sup>。例如,茅佳俊和刘清<sup>[65]</sup>通过吸附试验确定 Cr 的吸附模式和吸附参数,通过土柱试验计算溶质运移参数,并在此基础上构建粉煤灰土柱的 Hydrus 1D 模型,用于预测粉煤灰中 Cr 的析出规律;冯祯<sup>[66]</sup>从历史文献中获取 Ni 弥散系数和吸附系数,用于模拟青藏高原某矿山排土场重金属 Ni 的迁移转化过程;Dai 等<sup>[68]</sup>通过查阅历史文献、吸附试验和模型反演 3 种方式获得 Pb 的运移参数,用于模拟磷酸盐和生物质炭对土壤和地下水中重金属 Pb 的去除效果;Zhang 等<sup>[69]</sup>基于土柱试验数据计算得到 Sb 的迁移参数,用于研究矿渣滤液中 Sb 的迁移转化规律。此外,还有部分重金属运移研究只关注重金属随水流的迁移过程而未考虑其在土壤中可能发生的吸附过程<sup>[64]</sup>。

**2.2.4 有机物** 人类产生的抗生素、激素等有机物进入土壤后会对植物、微生物的生长和活动产生不利影响。Hydrus 可以利用不同的反应模式和参数模拟不同类型有机物在土壤中发生的降解转化过程。例如,Lyu 等<sup>[70]</sup>使用基于 Hydrus 1D 模拟北京某再生污水灌溉系统中 PPCPs(药品和化妆品)的浓度和分布,并考虑其降解过程,该模型中的 PPCPs 降解参数通过 EPI Suite<sup>TM</sup> 软件基于 PPCPs 的分子结构计算而得。

不过,并非所有基于 Hydrus 的有机物运移过程

模拟研究都考虑了目标有机物的降解转化过程。例如张步迪等<sup>[71-72]</sup>、张惠等<sup>[73]</sup>在利用 Hydrus 模拟抗生素磺胺嘧啶在土壤中的运移过程方面开展一系列研究,包括利用室内土柱运移试验数据反演抗生素磺胺嘧啶在某农田土壤中的运移参数,分析有机质、阳离子交换量、重金属和 pH 等对磺胺嘧啶运移的影响,这些研究均未考虑该抗生素是否在土壤中发生降解。李新峰和许蔷薇<sup>[74]</sup>使用 Hydrus 1D 模拟某储油罐泄露事件中石油烃类污染物进入土壤后的迁移过程,旨在预测石油烃到达潜水含水层的浓度和时间,该研究也未考虑石油烃是否进行降解与转化反应。

### 2.3 热运移模拟和土壤温度

包气带土壤的温度和热运移过程对植物生长、微生物活动、水和溶质的运移均有显著的影响<sup>[75]</sup>,不过我国在 Hydrus 热运移领域的研究相对较少。郭毅等<sup>[76]</sup>研究不同初始含水率下砂土有无水蒸气迁移的数值模拟,模型使用的热运移参数来自于经验公式,但该研究未将水分和温度模拟值与实测值进行比较。潘梦绮等<sup>[77]</sup>基于热示踪实验得到的土壤温度数据利用 Hydrus 反演模块计算热运移参数,结果表明反演结果具有较好的精度( $R^2$  为 0.96)。该研究重点关注参数反演效果,对于模拟结果未做详细讨论。Xiong 等<sup>[78]</sup>建立 Hydrus 1D 模型模拟中国云南喀斯特地貌的水、热运移过程,该研究的热运移参数来源于历史文献,模拟结果显示 Hydrus 1D 能较好地模拟 365 d 研究期内的降雨-入渗-蒸发过程,但在地下深处的模拟效果欠佳,作者认为可能是因为喀斯特地貌区内存在明显的优先流影响 Hydrus 模拟效果。

### 2.4 污水处理

除模拟不同溶质在自然环境中的运移过程外,Hydrus 也被成功应用于模拟氮、磷、有机物等污染物在不同种人工污染物处理系统中的迁移转化过程。土壤渗滤是一种常见的污水处理方法,渗滤系统中的土壤分层系人为设定,颗粒分布均匀而且进入系统的流量可控,因此该系统较适合采用 Hydrus 进行模拟。例如,杨红薇等<sup>[13]</sup>发现在将从文献中获取的铵态氮运移参数进行反演率定后,Hydrus 1D 可以很好地模拟人工快速渗滤系统中铵态氮的出水浓度, $R^2$  与 MSE 分别为 0.97 和 0.30 mmol/L。Pan 等<sup>[62]</sup>利用土柱试验模拟地下渗滤系统中的铵态氮转化过程,并建立 Hydrus 1D 模型,模拟量化渗滤系统的水力条件和温度变化对氮转化过程的影响。李家科等<sup>[79]</sup>将 Hydrus 1D 用于生物滞留系统中水和溶质的运移模拟,系统中溶质反应参数取值

均基于文献查阅和实验率定,该模型水量和溶质模拟结果的 Nse 值均高于 0.85。

除渗滤系统和生物滞留系统外,Hydrus 还被用于模拟人工湿地系统中的水分和溶质运移<sup>[80]</sup>。例如,Dai 等<sup>[81]</sup>使用从湿地取出的完整土柱进行室内溶质渗透试验,利用 Hydrus 1D 模拟原状土累积流量,研究湿地土壤对水分和溶质的截留作用,并进而研究湿地退化过程。John 等<sup>[82]</sup>使用 Hydrus 人工湿地模块模拟饱和和垂直上流式人工湿地,研究曝气强度对系统底物的分布影响和系统处理重庆某生活污水的效果,不过该研究未基于实际观测数据对 Hydrus 模拟性能进行评价。

### 2.5 模拟现状分析

表 1 总结了我国学者在 2017—2020 年间使用 Hydrus 模拟土壤水和溶质运移的一些代表性研究。对这些研究的模型版本、研究类型、模拟时空尺度、参数确定方法、模型评价指标等基本特征进行比较分析,可以看出目前我国的 Hydrus 模拟研究呈现以下主要特征。

1)Hydrus 模拟以 1D 研究为主。在目前,我国开展的 Hydrus 模拟研究中,建立 1D 模型的研究数量远多于 2D/3D 模型。一方面这是由于只有 Hydrus 1D 模型可以免费使用;另一方面,Hydrus 基于有限元法计算水和溶质运移,Hydrus 2D/3D 模型需要进行更为复杂的有限元网格划分,当 1D 模拟变为 2D/3D 模拟时,有限元网格数量呈几何级增长,由此造成计算结果更加难以收敛。

2)水分运移模拟以短时段、小区域为主,野外模拟大都包括根系吸水过程。除个别研究外,无论是室内土柱/土箱试验研究还是野外模拟研究,所建 Hydrus 模型的模拟深度大都在 2 m 以内,而模拟时段多在一年以内,有的土柱试验模拟时长只有数小时。此外,根系吸水过程可以显著影响土壤水分运移,因此进行野外模拟的 Hydrus 模型大都包含根系吸水模块。由于室内土柱和土箱内极少布置植物,因此在相关 Hydrus 模型中极少涵盖根系吸水过程。

3)溶质运移模拟以小区域为主,模拟时段范围较广。近年来我国开展的 Hydrus 溶质运移模拟研究以建立模拟室内土柱试验结果为主。除个别研究外,无论是室内土柱试验研究还是野外模拟研究,所建 Hydrus 模型的模拟深度大都在 3 m 以内,但模拟时段长短不一,其中室内土柱试验的模拟期变化范围为 500 min 至 600 d;室外模拟研究的模拟期变化范围为 800 min 至 20 a。



表 1 典型 Hydrus 水和溶质运移模拟研究比较  
Table 1 Comparison of typical Hydrus water and solute transport simulation studies

模拟对象	参考文献	版本	研究类型	模拟期	模拟深度	参数确定	模拟性能评价	根系吸水
水分	张瑞文等 <sup>[43]</sup>	1D	室外模拟	C: 12 d; V: 60 d	1.5 m	实验测定+反演率定	N/A	Y
	白晓等 <sup>[22]</sup>	1D	室外模拟	C: 2004—2009 年; V: 2010—2016 年	400 cm	模型预测	Nse: $-0.56 \sim 0.92$ , RMSE: $0.01 \sim 0.04$ , $R^2$ : $0.37 \sim 0.96$	Y
	王宇祥等 <sup>[45]</sup>	1D	室外模拟	2016—2019 年(每年 4—10 月); C: 2018 年 4—10 月	200 cm	实验测定+反演率定	Nse: $0.81 \sim 0.86$ , RMSE: $0.01 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ , $0.15 \text{ mm/d}$ ; $R^2$ : $0.86 \sim 0.91$	Y
	Li 等 <sup>[44]</sup>	1D	室外模拟	C: 2015 年 4—12 月; V: 2016 年 1—10 月	200 cm	实验测定+人工调试+反演率定	Nse: $0.60 \sim 0.80$	Y
	李冰冰等 <sup>[46]</sup>	1D	室外模拟	C: 2011 年 9 月—2012 年 9 月; V: 2012 年 10 月—2013 年 10 月	10 m	历史文献+反演率定	C: $R^2$ : $0.65, 0.85$ ; Nse: $0.55, 0.83$ ; RMSE: $0.01 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ , $0.02 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ ; V: $R^2$ : $0.74, 0.85$ ; Nse: $0.65, 0.76$ ; RMSE: $0.01 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$	Y
	高金花等 <sup>[53]</sup>	1D	室外模拟	99 d	60 cm	模型预测	$T_p$ : $0.17 \sim 0.54$	Y
	李豆豆等 <sup>[54]</sup>	2D/3D	室外模拟	灌溉事件后 120 h	100 cm	模型预测+反演率定	RMSE: $0.01 \sim 0.04 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ ; RMAE: $6.50 \sim 13.00$	N
	虎胆·吐马尔白等 <sup>[47]</sup>	2D	室外模拟	2018—2019 年	150 cm	模型预测+反演率定	C: RMSE: $0.02 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ , $R^2$ : $0.83$ ; V: RMSE: $0.02 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ , $R^2$ : $0.84$	Y
	徐俊增等 <sup>[48]</sup>	1D	盆栽试验	2017 年 5—11 月	40 cm	模型预测+反演率定	RMSE: $0.02 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ , $R^2$ : $0.76$	Y
	代智光 <sup>[10]</sup>	2D	土柱试验	200 min	50 cm	实验测定+反演率定	RMSE: $0.68 \sim 1.23 \text{ cm}$ , $R^2$ : $0.99$ , $P$ : $0.61 \sim 0.99$	N
	徐丽萍和张朝晖 <sup>[51]</sup>	1D	土箱试验	N/A	100 cm	实验测定	RMSE: $0.02 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ , $R^2$ : $0.86$	N
	Tong 等 <sup>[83]</sup>	1D	室外模拟	C: 2011 年 10 月—2012 年 12 月; V: 2013 年 2 月—2015 年 12 月	21 m	模型预测+反演率定	RMSE: $1.23 \sim 3.63 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ , $R^2$ : $0.43 \sim 0.87$ , RE: $-0.01 \sim 0.08$	N
	樊向阳等 <sup>[52]</sup>	3D	土柱试验+室外模拟	1 250 min	100 cm	实验测定+反演率定	RMSE: $1.12 \sim 1.41 \text{ cm}$ , $R^2$ : $0.85 \sim 0.92$ , $F_p$ : $0.09 \sim 0.76$	N
	Jie 等 <sup>[49]</sup>	N/A	土柱试验	360 min	40 cm	N/A	N/A	N
	Wang 等 <sup>[50]</sup>	2D	土柱试验+室外模拟	25 d	80 cm	实验测定+反演率定	NRMSE: $0.10 \sim 0.30 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$	Y
水盐	石培君等 <sup>[58]</sup>	N/A	室内模拟	C: 5 d; V: 90 d	1.8 m	N/A	RMSE: $0.20 \sim 1.32 \text{ g/kg}$ , $R^2$ : $0.91 \sim 0.99$	N/A
	赵然杭等 <sup>[11]</sup>	N/A	室外+室内模拟	3 096 h	100 cm	历史文献	$F_p$ : $0.10 \sim 0.99$	N/A
	姚荣江等 <sup>[60]</sup>	1D	室外模拟	2015 年 11 月—2017 年 11 月	100 cm	实验测定	Nse: $0.30 \sim 0.79$ , RMSE: $0.22 \sim 0.73 \text{ g/kg}$ ; $R^2$ : $0.39 \sim 0.91$ ; RE: $-0.05 \sim 0.15$	N/A
	Wang 等 <sup>[59]</sup>	1D	室外模拟	C: 2011—2012 年; V: 2012—2013 年	120 cm	历史文献	C: RMSE: $0.61 \text{ g/L}$ , $R^2$ : $0.92$ , MRE: $-4.6$ ; V: RMSE: $0.39 \text{ g/L}$ , $R^2$ : $0.93$ , MRE: $-3.1$	N/A

续表 1

模拟对象	参考文献	版本	研究类型	模拟期	模拟深度	参数确定	模拟性能评价	根系吸水
重金属	茅佳俊和刘清 <sup>[65]</sup>	1D	土柱试验	40 d	50 cm	实验测定	$R^2$ : 0.91	N/A
	冯祯 <sup>[66]</sup>	1D	室外模拟	20 a	20 m	历史文献	N/A	N/A
	万朔阳等 <sup>[67]</sup>	1D	土柱试验	12 d	20 cm	N/A	RMSE: 0.08 ~ 0.10 $\mu\text{g/L}$ , $R^2$ : 0.93 ~ 0.97, MAE: 0.06 ~ 0.09, ME: 0.03 ~ 0.04	N/A
	Zhang 等 <sup>[69]</sup>	1D	土柱试验	600 d	80 cm	实验测定	N/A	N/A
	Dai 等 <sup>[68]</sup>	1D	土柱试验	2 500 h	50 cm	历史文献+实验测定+模型反演	N/A	N/A
有机物	Lyu 等 <sup>[70]</sup>	1D	室外模拟	10 a	300 cm	EPI SuiteTM 软件	Nse: 0.87, RMSE: 0.04 $\mu\text{g/kg}$	N/A
	张步迪等 <sup>[71]</sup>	1D	土柱试验	N/A	30 cm	实验测定+模型反演	N/A	N/A
	张步迪等 <sup>[72]</sup>	1D	土柱试验	N/A	17 cm	实验测定+模型反演	N/A	N/A
	张惠等 <sup>[73]</sup>	1D	土柱试验	N/A	20 cm	实验测定+模型反演	N/A	N/A
	李新峰和许蔷薇 <sup>[74]</sup>	1D	泄露事件	1 800 min	2.7 m	历史文献	N/A	N/A
氮循环	Zhang 等 <sup>[34]</sup>	N/A	土柱试验	500 min	70 cm	N/A	N/A	N/A
	尹芝华等 <sup>[61]</sup>	2D	室外模拟	5 a	5 m	历史文献+模型反演	N/A	N/A
	杨红薇等 <sup>[13]</sup>	1D	土柱试验	42 h	80 cm	历史文献+模型反演	MSE: 0.03 mmol/L, $R^2$ : 0.97	N/A
	Pan 等 <sup>[62]</sup>	1D	土柱试验	C: 360 d, V: 280 d	120 cm	历史文献+模型反演	NRMSE: 0.02 ~ 0.83 mg/L	N/A
	Hou 等 <sup>[63]</sup>	1D	土柱试验	5 000 h	70 cm	实验测定+模型反演	RMSE: 0.02 ~ 0.10 mg/kg, RE: 0 ~ 0.05, $R^2$ : 0.97 ~ 0.99	N/A

注：①Nse 为纳什效率系数，MSE 为均方误差，RMSE 为均方根误差， $R^2$  为决定系数，RE 为相对误差，MRE 为平均相对误差(%), MAE 为平均绝对误差，ME 为平均误差，NRMSE 为归一化均方根误差，RMAE 为相对平均绝对误差(%),  $T_p$  为 T 检验  $P$  值， $F_p$  为 F 检验  $P$  值；N/A 表示缺乏此数据②C 为率定期；V 为验证期；③Y、N 分别代表考虑与未考虑根系吸水。

4)确定土壤水力参数取值多为实验测定/模型预测与反演率定相结合。确定合适的土壤水力参数取值是 Hydrus 水分运移模拟的关键步骤，部分 Hydrus 研究基于实验测定结果确定土壤水力参数取值<sup>[10, 51-52]</sup>。此外，Hydrus 的土壤水力参数神经网络预测模块允许用户基于土壤粒径分布、容重以及一、二个水分保持曲线数据点分层计算土壤水力参数取值。表 1 显示，不少学者使用该神经网络模块估计 Hydrus 模型土壤水力参数取值<sup>[10, 22, 47- 48, 55]</sup>。然而，基于神经网络模块获得的土壤水力参数取值往往存在较大误差

且不适用于深层土壤，且其对于美国以外研究区域的适用性有待研究<sup>[56]</sup>。为减少实验测定或神经网络模型预测造成的参数估计误差<sup>[57]</sup>，多数研究会基于实地土壤水分监测结果对土壤水力参数取值进一步进行反演率定。

5)土壤溶质运移参数取值多为实验测定/文献资料与反演率定相结合。与土壤水力参数不同，Hydrus 没有提供帮助确定溶质运移参数的模块。建立 Hydrus 溶质运移模型需要确定纵向弥散度(Disp)、自由水分子扩散系数(Diff-W)、土壤中空气分子扩散系数(Diff-



G)等溶质运移参数。此外,对于部分溶质还需要确定模拟吸附过程的吸附参数和降解转化过程中的零阶、一阶反应速率等参数。已有溶质迁移研究大都首先基于实验测定或文献查阅确定溶质运移参数初值,然后利用 Hydrus 反演模块,基于实测溶质浓度或通量等数据对参数取值进行反演。

此外,在重金属运移模拟中,有研究表明相较于批量吸附试验,基于土柱吸附试验得到的吸附系数模拟性能更优<sup>[75]</sup>。在有机物运移模拟中,除实验测定和文献查阅外,也有研究利用第三方软件 EPI SuiteTM 基于溶质分子结构估计运移参数取值<sup>[71]</sup>。在氮循环模拟中,鉴于氮循环过程的复杂性,相关研究大都只模拟研究涉及的主要氮转化过程,而忽略被认为是次要的反应过程。例如:尹芝华等<sup>[61]</sup>只关注硝化与反硝化过程;杨红薇等<sup>[13]</sup>、Hou 等<sup>[63]</sup>只模拟氨氮吸附过程;Pan 等<sup>[62]</sup>只考虑反硝化过程。由于前期在氮循环领域开展了广泛的基础研究,在氮循环的 Hydrus 模拟研究中,更多学者通过历史文献确定氮循环反应参数的初值。

## 2.6 Hydrus 应用局限与展望

经过数十年的发展,尽管 Hydrus 在多个环境领域得到广泛的应用,但对于前期研究的分析也揭示出目前在 Hydrus 应用中仍然存在一些局限。

1)基于室内土柱试验获取的 Hydrus 模型参数取值往往无法直接应用于野外的环境过程模拟,鲜有研究探索构建室内土柱模型与野外模型参数取值间的有效关联途径。此外,已有的 Hydrus 模型多局限于室内土柱、室外山体剖面等小尺度应用,将小尺度的模拟结果外推至大区域范围伴随着巨大的不确定性,有限的模拟结果外推效果不够理想<sup>[22,53-54]</sup>。

2)部分 Hydrus 研究未能明确溶质运移等参数的确定方式和最终取值,对模型的模拟性能缺乏客观的评估。同时,大部分研究没有将模拟时段分成独立的参数率定期和验证期,并对模型的模拟参数取值进行独立的率定和验证,这可能造成 Hydrus 模型参数的过拟合,削弱模型对于不同模拟环境条件的适应性和模拟结果的可靠性。

3)Hydrus 模型缺乏动态参数调整。以根系吸水模型为例,在 Hydrus 中输入根系吸水参数初始值后,这些参数无法动态变化<sup>[84]</sup>,因此不能充分考虑根系生长对水分消耗的影响,随着模拟时间的增加,模拟结果的误差会不断累积<sup>[34,83]</sup>。此外,Chen 等<sup>[85]</sup>在研究中发现 Hydrus 在同时模拟两种作物时只能输入一组根系吸收参数,无法对间作情景进行模拟,因此他

们将 Hydrus 1D 进行修正允许同时输入两组参数,但是由于缺乏相应的模型率定模块,相关参数需要手动进行校准。

4)Hydrus 模拟性能受模拟深度影响显著。不少研究结果显示 Hydrus 对表层土壤的模拟性能不佳<sup>[22,48,86]</sup>,而在环境条件更为稳定的土壤深层,模拟效果有明显提升<sup>[22]</sup>。究其原因,土壤表层更易受外界环境的影响,容易出现较大的压力梯度,即使在小区 Hydrus 也会生成数百万个有限元网格,模型模拟效果会受到显著影响。此外,为使迭代计算能够顺利进行,Hydrus 限制最多只能将土壤分为 10 层,这又对其深层土壤或者复杂土壤属性下的应用造成限制<sup>[83]</sup>。

Hydrus 具备多种边界条件,不仅能输入、输出水和溶质的浓度和通量,还能计算整个系统的物质平衡,近年来许多研究将 Hydrus 与其他模型进行耦合来解决实际问题。例如将 Hydrus 与地下水模型耦合<sup>[87]</sup>,建立较大流域范围内的水流循环模型<sup>[88]</sup>,基于实验测定<sup>[89]</sup>、人工试错以及算法优化<sup>[90]</sup>等方法获得模型参数,提高模拟效果;将 Hydrus 与随机森林模型、ICON 框架结合形成一套完整的温室气象-土壤温度含水量预报框架<sup>[91]</sup>;基于 Hydrus 3D 模拟土壤的水循环过程,基于 DNDC 模拟氮循环过程,并将二者耦合模拟太湖某丘陵山坡硝态氮的淋溶过程等<sup>[36]</sup>。目前,Hydrus 模型与其他模型耦合的工作才刚刚起步,主要侧重于与地下水和土壤生化循环模型间的松散耦合。可以预期未来将出现更多 Hydrus 与天气、地下水、地表径流、河流、农业经济活动等不同环境与社会经济领域模型间的耦合应用,实现对溶质在流域等大尺度范围内的迁移转化过程的全过程模拟,以研究自然与人类活动双重因素对溶质运移的影响,确定影响污染物迁移的关键过程和因素以及指导污染治理措施的制定与优化。

此外,Hydrus 的模拟功能有待进一步加强与完善。例如 Hydrus 缺乏对根系吸水和根系分布参数的优化功能<sup>[92]</sup>、不能考虑土壤表层的复杂径流<sup>[84]</sup>、缺乏根系生长模拟的温度响应<sup>[93]</sup>等。而许多学者针对 Hydrus 模型功能局限所开发的离心力、冻融过程、同位素和根系生长等扩展功能,也有待纳入 Hydrus 模块中,因而限制其广泛应用<sup>[94]</sup>。

## 3 结论

经过数十年的不断修改与完善,Hydrus 已经发展成为一个成熟的土壤物理环境模拟工具,在我国被广泛应用于不同环境领域的水分、溶质和热运移模拟

研究中。此外, Hydrus 还被用于研究土壤渗滤系统、生物滞留系统、人工湿地等人工污染物去除系统中氮磷和有机物等污染物的去除效果与影响因素。已有研究结果显示, Hydrus 能够较好地模拟水、营养盐、重金属、有机物等溶质在不同属性的多孔介质中的迁移转化过程。然而, 对于目前我国已开展的 Hydrus 水分和溶质运移研究的综合分析结果显示我国在 Hydrus 应用的一些领域还有待进一步规范与加强。例如, 已有的水分和溶质运移研究大都局限于对小区域或者室内土柱的一维模拟, 实验室测定土柱模拟获得的参数不直接适用于野外模拟, 小区域的模拟研究结果在大区域范围内应用受限; 一些研究未能明确对 Hydrus 模型水力和溶质运移参数的确定过程; 已有研究大都缺乏对模型参数取值进行独立的率定和验证, 从而削弱了模型对于不同模拟环境条件的适应性, 并增加了模拟结果的不确定性; 同时, 部分研究缺乏对模型模拟效果的系统评估, 模拟性能的评价指标也有待统一。

Hydrus 模型的设计初衷主要用于模拟包气带中水和不同溶质的运移过程。近年来, 有学者尝试进一步将 Hydrus 与其他环境领域的模型进行耦合, 从而实现溶质在流域等大尺度范围内的迁移转化过程的全程模拟。迄今, Hydrus 模型耦合研究大都局限于与地下水和土壤地化模型的松散耦合。预计未来基于多源数据融合实现 Hydrus 与多种环境领域模型和深度学习算法的有机融合将成为进一步拓展 Hydrus 应用的研究热点。

## 参考文献:

- [1] 李仁海, 周志超, 李杰彪, 等. 甘肃北山地区典型沟谷包气带土壤渗透特征研究[J]. 土壤通报, 2020, 51(6): 1380–1385.
- [2] 梁慧雅, 王仕琴, 魏守才. 华北山前平原典型厚包气带硝态氮分布累积规律[J]. 土壤, 2017, 49(6): 1179–1186.
- [3] 马蒙蒙, 林青, 徐绍辉. 不同因素影响下层状土壤水分入渗特征及水力参数估计[J]. 土壤学报, 2020, 57(2): 347–358.
- [4] 姜义宝, 史东梅, 江娜, 等. 土壤侵蚀对坡耕地土壤水分及入渗特性影响[J]. 土壤学报, 2020, 57(6): 1399–1410.
- [5] Zhao Y, Mao X M, Shukla M K. A modified SWAP model for soil water and heat dynamics and seed-maize growth under film mulching[J]. Agricultural and Forest Meteorology, 2020, 292/293: 108127.
- [6] 荣易, 秦成新, 孙傅, 等. SWAT 模型在我国流域水环境模拟应用中的评估验证过程评价[J]. 环境科学研究, 2020, 33(11): 2571–2580.
- [7] 王芳芳, 肖波, 孙福海, 等. 黄土高原生物结皮覆盖对风沙土和黄绵土溶质运移的影响[J]. 应用生态学报, 2020, 31(10): 3404–3412.
- [8] 刘阳, 王全九, 蔡丽娜, 等. 透气隔水埋体对土壤水分入参与溶质运移的影响[J]. 水土保持学报, 2020, 34(4): 152–157.
- [9] Provenzano G. Using HYDRUS-2D simulation model to evaluate wetted soil volume in subsurface drip irrigation systems[J]. Journal of Irrigation and Drainage Engineering, 2007, 133(4): 342–349.
- [10] 代智光. 基于 Hydrus-2D 的红壤区涌泉根灌自由入渗土壤水分运移数值模拟[J]. 干旱地区农业研究, 2020, 38(4): 27–31.
- [11] 赵然杭, 刘开印, 张扩成, 等. 引黄灌溉对土壤含盐量的影响研究[J]. 人民黄河, 2020, 42(11): 147–151.
- [12] 丁素玲. HYDRUS-1D 软件在土壤环境影响评价中的应用[J]. 环境影响评价, 2020, 42(4): 62–65.
- [13] 杨红薇, 郑雨蒙, 李舒涵, 等. 铵态氮在人工快渗系统中迁移转化的数值模拟研究[J]. 安全与环境学报, 2020, 20(3): 1090–1096.
- [14] 赵丹丹, 王志春. 土壤水盐运移 Hydrus 模型及其应用[J]. 土壤与作物, 2018, 7(2): 120–129.
- [15] Van Genuchten M T. Mass transport in saturated-unsaturated media: one-dimensional solutions[R]. Princeton: Princeton University, 1978.
- [16] Van Genuchten M T. A numerical model for water and solute movement in and below the root zone[R]. California: US Salinity Laboratory, 1987.
- [17] Vogel T. SWMII-Numerical model of two-dimensional flow in a variably saturated porous medium[R]. Wageningen: Wageningen Agricultural University, 1988.
- [18] Kool J B, van Genuchten M T. One-dimensional variably saturated flow and transport model including hysteresis and root water uptake. Version 3.3[R]. California: US Salinity Laboratory, 1989.
- [19] Simunek J. The HYDRUS 1D software package for simulating the one-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably saturated porous media (Version 4.17)[M]. California: Colorado School of Mines Publishers, 2013.
- [20] Šimunek J, Šejna M, Saito H, et al. The hydrus-1D software package for simulating the movement of water, heat, and multiple solutes in variably saturated media, version 4.17, HYDRUS software series 3, department of environmental sciences, university of California riverside, riverside, California[EB/OL]. 2013.
- [21] Imunek J Å, van Genuchten M T, Ejna M Å. HYDRUS: model use, calibration, and validation[J]. Transactions of the ASABE, 2012, 55(4): 1263–1276.
- [22] 白晓, 贾小旭, 邵明安, 等. 黄土高原北部土地利用变化对长期土壤水分平衡影响模拟[J]. 水科学进展, 2021, 32(1): 109–119.
- [23] 毕彪, 钱云楷, 艾宪峰, 等. 基于 HYDRUS-1D 模拟的降雨入渗条件下 VG 模型参数敏感性分析[J]. 长江科学院院报, 2021, 38(7): 36–41.

- [24] 葛菲媛, 刘景兰, 李立伟. 基于Hydrus-1D的滨海围填造陆区包气带中污染物运移的数值模拟[J]. 资源信息与工程, 2020, 35(4): 130–132.
- [25] 郭雯, 卢玉东, 卢阳春, 等. 基于Hydrus-1d模型的干旱区绿洲灌溉入渗研究[J]. 水电能源科学, 2020, 38(8): 129–132, 90.
- [26] 任华丽. COD 污染物在包气带中迁移的 HYDRUS-1D 模型预测——以某碳酸锂项目为例[J]. 中国金属通报, 2020(8): 146–147, 150.
- [27] Al-Shukaili A, Al-Busaidi H, Kacimov A R. Experiments, analytical and HYDRUS<sub>2D</sub> modeling of steady jet of quasi-normal surface flow in rectangular channel coupled with vertical seepage: Vedernikov-Riesenkampf's legacy revisited[J]. *Advances in Water Resources*, 2020, 136: 103503.
- [28] Giltrap D, Jolly B, Bishop P, et al. Modelling 3D urine patch spread in grazed pasture soils to determine potential inhibitor effectiveness[J]. *Agriculture, Ecosystems & Environment*, 2020, 292: 106809.
- [29] 张恩继, 王霖. 土壤水分运移模拟研究进展[J]. 南方农业, 2019, 13(20): 188–190.
- [30] Wang X, Zhao Y L, Liu H F, et al. Evaluating the water holding capacity of multilayer soil profiles using hydrus-1D and multi-criteria decision analysis[J]. *Water*, 2020, 12(3): 773.
- [31] 张志飞, 胡现振, 郭强, 等. DLS-II 型负压计在测定土壤水势中的应用研究[J]. 地下水, 2017, 39(5): 167–170.
- [32] 任健, 张吴平, 王国芳, 等. 基于离心法获取定体积质量下的土壤水分特征曲线[J]. 灌溉排水学报, 2020, 39(1): 84–90.
- [33] Fichtner T, Ibrahim S I, Hamann F, et al. Purification efficiency for treated waste water in case of joint infiltration with water originating from precipitation[J]. *Applied Sciences*, 2020, 10(9): 3155.
- [34] Zhang H, Yang R X, Guo S S, et al. Modeling fertilization impacts on nitrate leaching and groundwater contamination with HYDRUS-1D and MT3DMS[J]. *Paddy and Water Environment*, 2020, 18(3): 481–498.
- [35] 王登, 霍思远, 孙芳, 等. 人工溴示踪法评价潜水蒸发可行性数值模拟[J]. 水文地质工程地质, 2020, 47(1): 19–27.
- [36] Lai X M, Liu Y, Zhou Z W, et al. Investigating the spatio-temporal variations of nitrate leaching on a tea garden hillslope by combining HYDRUS-3D and DNDC models[J]. *Journal of Plant Nutrition and Soil Science*, 2020, 183(1): 46–57.
- [37] 李幻, 吴家琦, 侯蕊, 等. 应用一步流动法快速测定土水特征曲线试验研究[J]. 人民长江, 2020, 51(2): 160–165.
- [38] Busscher W. Simulation of field water use and crop yield[J]. *Soil Science*, 1980, 129(3): 193.
- [39] van Genuchten M T. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils[J]. *Soil Science Society of America Journal*, 1980, 44(5): 892–898.
- [40] Kulmatiski A, Adler P B, Foley K M. Hydrologic niches explain species coexistence and abundance in a shrub-steppe system[J]. *Journal of Ecology*, 2020, 108(3): 998–1008.
- [41] 李保国, 胡克林, 黄元仿, 等. 土壤溶质运移模型的研究及应用[J]. 土壤, 2005, 37(4): 345–352.
- [42] Sophocleous M. Analysis of water and heat flow in unsaturated-saturated porous media[J]. *Water Resources Research*, 1979, 15(5): 1195–1206.
- [43] 张瑞文, 赵成义, 王丹丹, 等. 极端干旱区不同水分条件下胡杨林生态耗水特征[J]. 水土保持学报, 2019, 33(4): 270–278.
- [44] Li L J, Song X Y, Xia L, et al. Modelling the effects of climate change on transpiration and evaporation in natural and constructed grasslands in the semi-arid Loess Plateau, China[J]. *Agriculture, Ecosystems & Environment*, 2020, 302: 107077.
- [45] 王宇祥, 刘廷玺, 段利民, 等. 半干旱地区半流动沙丘水分深层渗漏量及其对降雨格局的响应[J]. 应用生态学报, 2020, 31(8): 2710–2720.
- [46] 李冰冰, 王云强, 李志. HYDRUS-1D 模型模拟渭北旱塬深剖面土壤水分的适用性[J]. 应用生态学报, 2019, 30(2): 398–404.
- [47] 虎胆·吐马尔白, 焦萍, 米力夏提·米那多拉. 新疆干旱区成龄核桃滴灌制度优化[J]. 农业工程学报, 2020, 36(15): 134–141.
- [48] 徐俊增, 程衡, 卫琦, 等. 基于饱和土壤埋深调控的水稻节水灌溉技术研究[J]. 农业机械学报, 2020, 51(10): 345–352.
- [49] Jie F L, Fei L J, Zhong Y, et al. Wetting body characteristics and infiltration model of film hole irrigation[J]. *Water*, 2020, 12(5): 1226.
- [50] Wang J J, Long H Y, Huang Y F, et al. Effects of different irrigation management parameters on cumulative water supply under negative pressure irrigation[J]. *Agricultural Water Management*, 2019, 224: 105743.
- [51] 徐丽萍, 张朝晖. 基于Hydrus-1D的滴灌土壤水分运移数值模拟[J]. 节水灌溉, 2019(2): 64–67.
- [52] 樊向阳, 费良军, 代智光, 等. 基于Hydrus-3D模型的再生水涌泉根灌模拟及布置参数预测[J]. 水土保持学报, 2019, 33(4): 133–139.
- [53] 高金花, 张礼绍, 廉冀宁, 等. 膜下滴灌结合暗管技术土壤水盐特性研究[J]. 中国农村水利水电, 2019(9): 76–82.
- [54] 李豆豆, 席本野, 唐连峰, 等. 砂壤土下滴灌毛白杨幼林土壤水分运移规律与模拟[J]. 林业科学, 2018, 54(12): 157–168.
- [55] 王遥, 刘玉春, 王宁, 等. 元氏冬小麦适宜灌水定额数值模拟[J]. 河北农业大学学报, 2020, 43(4): 104–111.
- [56] Zhang Y Y, Lee D, Ding J, et al. Environmental impact of high concentration nitrate migration in soil system using HYDRUS simulation[J]. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 2020, 17(9): 3147.

- [57] Elliott J, Price J. Comparison of soil hydraulic properties estimated from steady-state experiments and transient field observations through simulating soil moisture in regenerated *Sphagnum* moss[J]. *Journal of Hydrology*, 2020, 582: 124489.
- [58] 石培君, 刘洪光, 何新林, 等. 基于 HYDRUS 模型的暗管排水水盐运移模拟[J]. *干旱地区农业研究*, 2019, 37(3): 224–231.
- [59] Wang X P, Liu G M, Yang J S, et al. Evaluating the effects of irrigation water salinity on water movement, crop yield and water use efficiency by means of a coupled hydrologic/crop growth model[J]. *Agricultural Water Management*, 2017, 185: 13–26.
- [60] 姚荣江, 杨劲松, 郑复乐, 等. 基于表观电导率和 Hydrus 模型同化的土壤盐分估算[J]. *农业工程学报*, 2019, 35(13): 91–101.
- [61] 尹芝华, 杜青青, 翟远征, 等. 利用 HYDRUS-2D 软件模拟污染事故后三氮污染物的迁移转化规律[J]. *环境污染与防治*, 2017, 39(10): 1071–1076.
- [62] Pan W Y, Huang Q Z, Xu Z H, et al. Experimental investigation and simulation of nitrogen transport in a subsurface infiltration system under saturated and unsaturated conditions[J]. *Journal of Contaminant Hydrology*, 2020, 231: 103621.
- [63] Hou L Z, Hu B X, Qi Z M, et al. Evaluating equilibrium and non-equilibrium transport of ammonium in a loam soil column[J]. *Hydrological Processes*, 2018, 32(1): 80–92.
- [64] 白利勇, 季慧慧, 孙文轩, 等. 粉煤灰中重金属 Pb/Cr/Cu 在土壤——小白菜中的迁移与形态转化[J]. *土壤学报*, 2019, 56(3): 682–692.
- [65] 茅佳俊, 刘清. 基于 Hydrus-1D 的粉煤灰堆场 Cr(VI)在包气带中迁移规律的研究[J]. *能源环境保护*, 2019, 33(1): 13–18, 25.
- [66] 冯祯. Hydrus-1D 在金属矿山排土场环境影响评价中的应用研究[J]. *世界有色金属*, 2020(13): 161–162.
- [67] 万朔阳, 吴勇, 唐学芳, 等. 基于 Hydrus-1D 对西坝镇农田土壤重金属迁移模拟及空间解析[J]. *科学技术与工程*, 2020, 20(2): 854–859.
- [68] Dai Y H, Liang Y, Xu X Y, et al. An integrated approach for simultaneous immobilization of lead in both contaminated soil and groundwater: Laboratory test and numerical modeling[J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2018, 342: 107–113.
- [69] Zhang Y, Ren B Z, Hursthouse A, et al. Study on the migration rules of Sb in antimony ore soil based on HYDRUS-1D[J]. *Polish Journal of Environmental Studies*, 2018, 28(2): 965–972.
- [70] Lyu S D, Chen W P, Qian J P, et al. Prioritizing environmental risks of pharmaceuticals and personal care products in reclaimed water on urban green space in Beijing[J]. *Science of the Total Environment*, 2019, 697: 133850.
- [71] 张步迪, 林青, 徐绍辉. 磺胺嘧啶在原状土柱中的运移特征及模拟[J]. *土壤学报*, 2018, 55(4): 879–888.
- [72] 张步迪, 林青, 徐绍辉. Cd/Cu/Pb 对磺胺嘧啶在土壤中吸附迁移的影响[J]. *土壤学报*, 2018, 55(5): 1120–1130.
- [73] 张惠, 林青, 徐绍辉. 磺胺嘧啶在覆铁石英砂中迁移特征及数值模拟[J]. *中国环境科学*, 2019, 39(11): 4712–4721.
- [74] 李新峰, 许蔷薇. 基于土壤预测模型的石油类污染迁移的研究[J]. *环境与发展*, 2020, 32(8): 123–124, 126.
- [75] Behrooz A, Arora M, Fletcher T D, et al. Sorption and transport behavior of zinc in the soil; Implications for stormwater management[J]. *Geoderma*, 2020, 367: 114243.
- [76] 郭毅, 晋华, 桂金鹏. 不同初始含水率砂土水-汽-热耦合迁移数值模拟[J]. *节水灌溉*, 2019(8): 102–107.
- [77] 潘梦绮, 黄权中, 冯榕, 等. 基于热示踪的饱和层状介质水热参数反演[J]. *水利学报*, 2017, 48(11): 1363–1372.
- [78] Xiong X F, Li J H, Zhang T, et al. Simulation of coupled transport of soil moisture and heat in a typical Karst rocky desertification area, Yunnan Province, Southwest China[J]. *Environmental Science and Pollution Research International*, 2021, 28(4): 4716–4730.
- [79] 李家科, 赵瑞松, 李亚娇. 基于 HYDRUS-1D 模型的不同生物滞留池中水分及溶质运移特征模拟[J]. *环境科学学报*, 2017, 37(11): 4150–4159.
- [80] Pucher B, Langergraber G. Simulating vertical flow wetlands using filter media with different grain sizes with the HYDRUS Wetland Module[J]. *Journal of Hydrology and Hydromechanics*, 2018, 66(2): 227–231.
- [81] Dai L Y, Zhang Y H, Zhang Z M, et al. Hydrological connectivity assessment based on solute penetration[J]. *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*, 2020, 34(6): 909–919.
- [82] John Y, Langergraber G, Adyel T M, et al. Aeration intensity simulation in a saturated vertical up-flow constructed wetland[J]. *Science of the Total Environment*, 2020, 708: 134793.
- [83] Tong Y P, Wang Y Q, Song Y, et al. Spatiotemporal variations in deep soil moisture and its response to land-use shifts in the Wind-Water Erosion Crisscross Region in the Critical Zone of the Loess Plateau (2011–2015), China[J]. *CATENA*, 2020, 193: 104643.
- [84] Bristow K L, Šimůnek J, Helalia S A, et al. Numerical simulations of the effects furrow surface conditions and fertilizer locations have on plant nitrogen and water use in furrow irrigated systems[J]. *Agricultural Water Management*, 2020, 232: 106044.
- [85] Chen N, Li X Y, Šimůnek J, et al. Evaluating soil nitrate dynamics in an intercropping dripped ecosystem using HYDRUS-2D[J]. *Science of the Total Environment*, 2020, 718: 137314.
- [86] Wang X C, Li J, Tahir M N, et al. Validation of the EPIC model and its utilization to research the sustainable recovery of soil desiccation after alfalfa (*Medicago sativa* L.) by grain crop rotation system in the semi-humid region of the Loess Plateau[J]. *Agriculture, Ecosystems & Environment*, 2012, 161: 152–160.

- [87] Twarakavi N K C, Šimůnek J, Seo S. Evaluating interactions between groundwater and vadose zone using the HYDRUS-based flow package for MODFLOW[J]. *Vadose Zone Journal*, 2008, 7(2): 757–768.
- [88] 张贺. 基于 HYDRUS-MODFLOW 的大洋河岫岩流域地表水与地下水耦合模型[J]. *陕西水利*, 2020(3): 7–9,14.
- [89] 张旭洋, 林青, 黄修东, 等. 大沽河流域土壤水-地下水流耦合模拟及补给量估算[J]. *土壤学报*, 2019, 56(1): 101–113.
- [90] 胡丹, 伍靖伟, 黄介生. 基于 PEST 的 MODFLOW-HYDRUS 耦合模型参数优化[J]. *中国农村水利水电*, 2017(7): 38–44.
- [91] Tsai Y Z, Hsu K S, Wu H Y, et al. Application of random forest and ICON models combined with weather forecasts to predict soil temperature and water content in a greenhouse[J]. *Water*, 2020, 12(4): 1176.
- [92] Šípek V, Hnilica J, Vlček L, et al. Influence of vegetation type and soil properties on soil water dynamics in the Šumava Mountains (Southern Bohemia)[J]. *Journal of Hydrology*, 2020, 582: 124285.
- [93] Hartmann A, Šimůnek J, Aidoo M K, et al. Implementation and application of a root growth module in HYDRUS[J]. *Vadose Zone Journal*, 2017, 17(1): 170040.
- [94] Šimůnek J, Genuchten M T, Šejna M. Recent developments and applications of the HYDRUS computer software packages[J]. *Vadose Zone Journal*, 2016, 15(7): 1–25.