

DOI:10.13476/j.cnki.nsbdqk.2021.0122

孙晓文,彭辉.非饱和带-饱和带全耦合氮素迁移转化数值模拟[J].南水北调与水利科技(中英文),2021,19(6):1194-1207.
SUN X W,PENG H.Numerical simulation of nitrogen transportation and transformation in fully coupled unsaturated-saturated zones[J].South-to-North Water Transfers and Water Science & Technology,2021,19(6):1194-1207.(in Chinese)

非饱和带-饱和带全耦合氮素迁移转化数值模拟

孙晓文¹,彭辉^{1,2}

(1.中国海洋大学环境科学与工程学院,山东 青岛 266100;

2.中国海洋大学海洋环境与生态教育部重点实验室,山东 青岛 266100)

摘要:为探究地下水中氮素的迁移转化规律,建立三维非饱和带-饱和带完全耦合的水动力和溶质运移的数值模型,考虑氮素的矿化、硝化、反硝化等反应过程,利用 COMSOL 软件进行模型求解。将构建的模型应用于山东半岛小沽河地区,利用地下水位和氮素质量浓度监测数据对模型进行校验。根据模型结果分析水位及氮素分布的时空变化,探究灌溉量、施肥量及作物类型对氮素在地下水中分布的影响,并对硝态氮在地下水中长期富集过程进行预测。结果表明,建立的非饱和带-饱和带完全耦合模型能够准确地模拟水动力和溶质迁移转化过程:当抽水灌溉量分别减小 10%、20%时,硝态氮质量浓度降低 2.17、2.98 mg/L,氨氮质量浓度降低 0.02、0.03 mg/L;当施肥量分别增加 25%、降低 25%时,地下水中硝态氮质量浓度分别增加 2.60 mg/L、降低 3.16 mg/L,氨氮质量浓度分别增加 0.02 mg/L、降低 0.02 mg/L;将夏玉米-冬小麦轮作农田改植蔬菜后硝态氮质量浓度年平均升高 23.93 mg/L,氨氮质量浓度年平均增加 0.29 mg/L;长期不施肥硝态氮质量浓度明显降低,5年总降低量为33.48 mg/L。

关键词:非饱和带-饱和带;完全耦合;氮素运移;COMSOL;数值模拟;污染预测

中图分类号:TV211;X523

文献标志码:A

开放科学(资源服务)标志码(OSID):



地下水氮素污染已成为国际上普遍关注的、最严重的环境地质问题之一,山东半岛作为我国重要的农业基地,由于大量施用氮肥和粪肥,已成为我国硝酸盐污染最严重的地区之一^[1]。农业氮肥过量施用是地下水硝酸盐污染的重要来源^[2],而且过量氮素从地表经过非饱和带进入饱和带,再经过复杂的生物地球化学过程转化为硝酸盐进入地下水中^[3-4]。建立非饱和带-饱和带耦合的氮素迁移转化模型能够更准确地探究地下水氮素富集的规律,并可用于预测不同农田措施对地下水氮污染的影响,为区域水资源管理提供科学依据。

目前非饱和带和饱和带耦合的研究,主要分为迭代耦合和完全耦合^[5]两种方法。迭代耦合通过分

别建立非饱和带和饱和带模型模拟两者之间的定性和定量关系^[6],常使用土壤-水和氮模型模拟非饱和水流和氮转化过程,使用地下水模型模拟地下水流和氮迁移过程。例如:Facchi等^[7]将SVAT模型和MODFLOW耦合,通过GIS实现模型参数的输入和结果可视化,模拟了灌溉、地下水补给和地下水位波动之间的相互作用;Huan等^[8]利用HYDRUS 1D-FEFLOW建立非饱和带-饱和带耦合数值模型模拟了地下水污染强度,并评估了地下水源地地下水硝酸盐污染风险。迭代耦合的方法限制了模型之间的反馈,而完全耦合模型将非饱和带和饱和带的控制方程统一求解,常用的完全耦合模型包括COMSOL^[9]、OpenGeoSys^[10]、HydroGeo-

收稿日期:2021-01-30 修回日期:2021-07-05 网络出版时间:2021-07-12

网络出版地址:<https://kns.cnki.net/kcms/detail/13.1430.TV.20210712.0935.002.html>

基金项目:国家自然科学基金项目(41731280;U1906215)

作者简介:孙晓文(1996—),女,河南濮阳人,主要从事地下水环境模拟研究。E-mail:18749936319@163.com

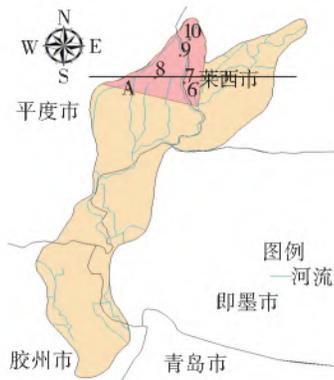
通信作者:彭辉(1984—),女,山东泰安人,副教授,主要从事流域水文水环境模拟研究。E-mail:pengh@ouc.edu.cn

Sphere^[11]、InHM^[12]等。OpenGeoSys、HydroGeo-Sphere 和 InHM 均只能模拟保守物质的迁移过程,不能模拟溶质转化的过程^[13-14],而 COMSOL 可进行多物理场仿真模拟^[15-16],其中的理查兹方程(Richards' equation)和多孔介质稀物质传递(transport of diluted species in porous media)模块可以用于非饱和带-饱和带完全耦合的氮素迁移转化过程的求解。

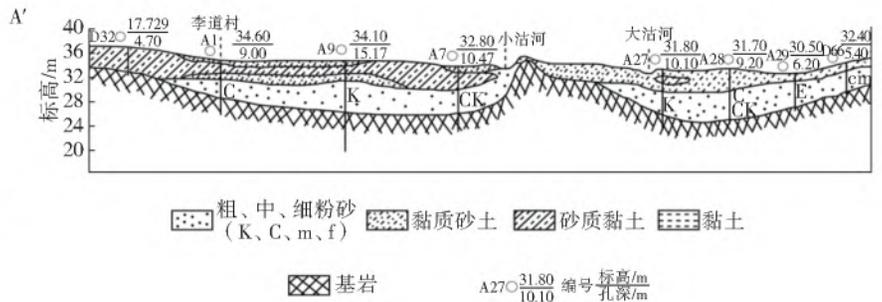
本研究以山东半岛的农业区小沽河地区为研究对象,建立非饱和带-饱和带完全耦合的水流和溶质数值模拟,采用 COMSOL 软件求解,研究在不同灌溉量、施肥量及作物类型情况下氮素的污染分布状况,为地下水氮素污染防治提供理论基础。

1 研究区概况

研究区位于中国山东省青岛市大沽河地下水源



(a) 研究区位置



(b) 研究区A-A' 水文地质剖面

图1 研究区示意图

Fig. 1 Diagram of study area

2 研究方法

2.1 地下水样品采集及分析

在研究区内开展了2018年6月—2019年5月的地下水位观测和水质样品采集工作。共设有5个观测和采样点,见图1(a)。在每个采样点使用水位测量尺测定地下水埋深,并使用Bailer采样器进行水样采集,每个采样点取500 mL地下水,其中250 mL用于DO、pH和Ec的现场测定,250 mL经0.45 μm聚醚砜过滤器后保存于棕色玻璃瓶中,在4℃条件下保存运输到实验室进行溶解性氮含量(硝态氮、溶解性有机氮、氨氮、亚硝态氮和总氮)的测定。DO、pH和Ec测定使用多参数水质测定仪(HQ40d, HACH, 美国)。

实验室内测定硝态氮采用紫外分光光度法(2800UV/VIS, ONICO 澳大利亚),氨氮采用纳氏

地中的小沽河流域部分地区,见图1(a),面积约73.5 km²,属于华北大陆性季风气候。研究区地层构成主要为第四系松散砂层结构,上层是黏质砂土和砂质黏土,下层是较厚的砂砾层,主要为粗、中、细粉砂,砾石从北向南逐渐变薄,粒度逐渐变细,从浅层到深层,粒度逐渐变粗^[17]。该区域地下水以非承压地下水为主,深度较浅,下层是小沽河流域地下水的主要含水层,具有很强的蓄水能力。上游含水层(北部)的厚度较薄,深度较浅,渗透率优于下游含水层(南部)。下游含水层的厚度较大,但渗透率和补给条件却比上游含水层差^[18]。

研究区地下水补给主要是大气降水和河流入渗,部分为地下径流的侧向补给。主要排泄方式是人工开采、蒸发式排泄及径流的作用,人工开采主要用于农业灌溉,主要作物类型是冬小麦-夏玉米。

试剂方法测定,亚硝态氮采用重氮耦合分光光度法,总氮采用过硫酸钾氧化法测定,溶解性有机氮(DON)的含量由差减法得到,即为DON含量=总氮含量-硝态氮含量-氨氮含量-亚硝态氮含量。

2.2 水文地质概念模型

2.2.1 地层概化

构建合理的水文地质概念模型对于模型构建有着至关重要的作用^[19]。由研究区内27个钻孔所获得的信息可得,该地区在垂向上岩性分别为耕植土,黏质砂土及砂质黏土,粗、中细粉砂和基岩,水文地质剖面图见图1(b)。黏质砂土及砂质黏土的渗透系数与粗、中细粉砂相差较大,因此,将研究区地层结构概化为两层:上层以黏质砂土和砂质黏土为主,厚度为2~7 m;下层为粗、中细粉砂,厚度为3~8 m,潜水含水层分布于下层。由钻孔数据得到研究区27个点各层高程数

据,利用 ArcGIS 插值后导入 COMSOL 模型中。综合研究区内钻孔数据和水位埋深,对研究区进

行分区,分区情况见图 2(a),模型参数设置时进行分区设置。

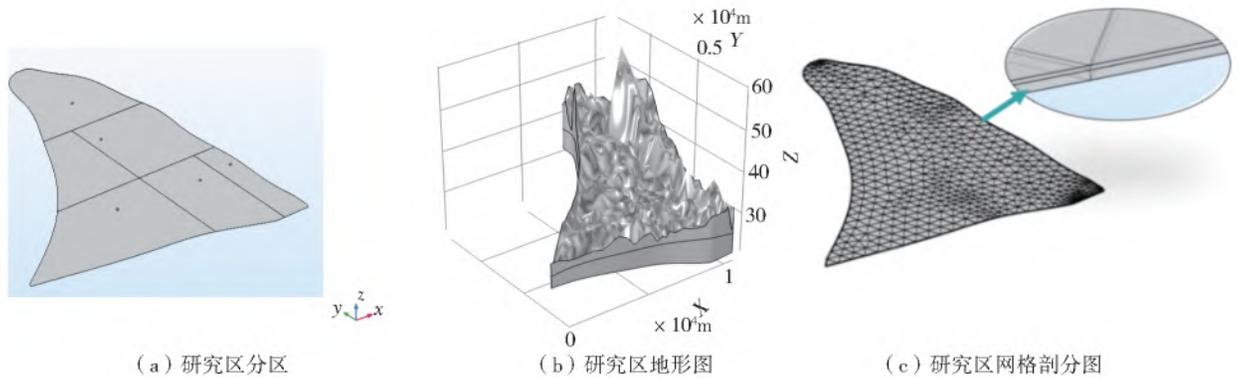


图 2 研究区地形概化

Fig. 2 Topographic generalization map of the study area

2.2.2 边界条件

(1)侧向边界。研究区北部和东部为大沽河水源地边界,北部为透水边界,水位根据邻近的监测数据确定;由于小沽河水流流向大沽河,将南部概化为透水边界,通过邻近监测数据插值得到水位,再根据水位差算出水流速度;研究区的东侧为含水层自然边界,多为白垩系黏土岩,含水层透水性弱,因此将其概化为隔水边界;西侧为大沽河和小沽河分水岭,将其概化为隔水边界,且东西两侧无溶质交换。由于北部流入和流出的水中硝酸盐含量很低,将其视为无硝酸盐交换,将南部设为硝酸盐流出边界。

(2)垂向边界。研究区上边界条件概化为大气边界,主要以降水和蒸发蒸腾的方式与外界发生水量交换,模型上下层之间设为透水层,研究区底部边界为透水性极差的基岩,所以模型下边界概化为隔水边界。

2.2.3 初始条件

根据实测数据确定模型初始条件:利用模拟期开始时刻(2018年6月1日)的地下水位实测值插值得到水位的初始值,利用2018年6月1日的硝态氮、氨氮和DON实测数据插值得到氮素模拟的初始值。

2.2.4 源汇项

(1)降雨量。模拟采用的降雨序列为青岛气象站2018年6月—2019年5月的资料(中国气象数据网),研究区6—9月为降雨高峰期。

(2)蒸散发量。蒸散发考虑了土壤蒸发和作物蒸腾作用,首先通过彭曼-蒙特斯(Penman-Monteith)公式^[20]计算得到参考作物腾发量,然后再采取作物系数 K_c 和土壤水分修正系数 K_s 对其进行修正^[21],即

$$ET = K_c K_s ET_0 \quad (1)$$

$$K_s = c \left(\frac{\theta - \theta_{wp}}{\theta_j - \theta_{wp}} \right)^d \quad (2)$$

式中: ET 为实际作物蒸发蒸腾量,mm; ET_0 为参考作物蒸发蒸腾量,mm; c 、 d 是由实测资料确定的参数; θ 是计算时段内作物根系活动层内的平均土壤含水量; θ_{wp} 是凋萎系数; θ_j 是作物蒸发蒸腾开始受影响时的临界含水量。该研究区以种植夏玉米和冬小麦轮作为主, K_c 的参数值以胶东区北邢家为例^[21], K_s 的值根据康绍忠等^[21]定义的幂函数公式确定,由土壤水分修正系数 K_s 和土壤含水量 θ 的关系表,确定 K_s 取值为0.6,计算得到的蒸发量输入模型中。

(3)地下水开采量。由于研究区内地下水开采主要用于农业灌溉,在模型中将地下水开采概化为面状的形式,即假设每个单元格中均有开采。根据收集的资料在模型中对研究区进行开采量分区,不同区域设置了不同的地下水开采量。

(4)灌溉量。该研究区以种植夏玉米和冬小麦轮作为主,根据《山东省主要农作物灌溉定额》(DB 37/T 1640.1—2015)^[22]确定夏玉米灌溉量为 $1\ 875\ \text{m}^3/\text{hm}^2$,冬小麦灌溉量为 $3\ 330\ \text{m}^3/\text{hm}^2$ 。夏玉米共设置3次灌溉,分别为6月初、7月初和8月底。冬小麦设置三次灌溉,分别为10月初、1月底和4月底。

(5)河流补给量。模拟期内(2018—2019年)小沽河河道干涸,对地下水没有补给,模型中忽略了河流的补给作用。

(6)施肥量。根据《小麦、玉米、水稻三大粮食作物的区域大配方与施肥建议(2013)》^[23]确定夏玉米的施肥量为 $400\ \text{kg}/\text{hm}^2$,冬小麦施肥量为 $500\ \text{kg}/\text{hm}^2$ 。该地区主要施用复合肥和农家肥,按照肥料的90%

为含氮量,将其概化为 DON 在模型中输入,两种作物均设置施肥次数为 3 次,夏玉米施肥时间为 6 月初、7 月初和 8 月底,冬小麦施肥时间为 10 月初、1 月底和 4 月底。

2.2.5 参数确定

模型参数主要包括渗透系数、饱和含水率、残余含水率、储水系数、Van Genuchten 模型中参数 α 和 n 、弥散度、矿化反应系数、硝化反应系数和反硝化反应系数等。根据相关文献^[24-25]确定参数 α 和 n ,储水系数由经验公式^[26]确定。根据文献^[27-28]确定渗透系数、饱和含水率、残余含水率、弥散度、矿化反应系数、硝化反应系数和反硝化反应系数的取值范围,在取值范围内进行了参数分区率定。

2.3 非饱和带-饱和带水动力和溶质数值模型

非饱和带水流和溶质运动常概化为一维或二维运动,饱和带水流和溶质为三维运动,为了将非饱和

$$\frac{\partial(\theta C_1)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(\theta D_{xx} \frac{\partial C_1}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\theta D_{yy} \frac{\partial C_1}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(\theta D_{zz} \frac{\partial C_1}{\partial z}) - \frac{\partial(\theta u_x C_1)}{\partial x} - \frac{\partial(\theta u_y C_1)}{\partial y} - \frac{\partial(\theta u_z C_1)}{\partial z} + f_1 \quad (4)$$

$$f_1 = -K_1 \theta C_1 \quad (5)$$

$$\frac{\partial(\theta C_2)}{\partial t} + \frac{\partial C_2 \rho s_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(\theta D_{xx} \frac{\partial C_2}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\theta D_{yy} \frac{\partial C_2}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(\theta D_{zz} \frac{\partial C_2}{\partial z}) - \frac{\partial(\theta u_x C_2)}{\partial x} - \frac{\partial(\theta u_y C_2)}{\partial y} - \frac{\partial(\theta u_z C_2)}{\partial z} + f_2 \quad (6)$$

$$f_2 = K_1 \theta C_1 - S_2 C_2 - K_2 \theta C_2 \quad (7)$$

$$\frac{\partial(\theta C_3)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(\theta D_{xx} \frac{\partial C_3}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\theta D_{yy} \frac{\partial C_3}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(\theta D_{zz} \frac{\partial C_3}{\partial z}) - \frac{\partial(\theta u_x C_3)}{\partial x} - \frac{\partial(\theta u_y C_3)}{\partial y} - \frac{\partial(\theta u_z C_3)}{\partial z} + f_3 \quad (8)$$

$$f_3 = K_2 \theta C_2 - S_3 C_3 - K_3 \theta C_3 \quad (9)$$

式中:下标 1、2、3 分别代表 DON、氨氮、硝态氮; C 为溶质浓度,mmol/L; D_{xx} 、 D_{yy} 、 D_{zz} 分别为 3 个方向的弥散系数, m^2/d ; u 为渗流速度, m/d ; f 为源汇项, $mmol/(L \cdot d)$; θ 为体积含水量; ρ 为土壤容重, g/cm^3 ; s_2 为线性吸附平衡常数,反映土壤颗粒对氨氮的吸附, m^3/kg ; K_1 、 K_2 、 K_3 分别为矿化速率常数、硝化速率常数和反硝化速率常数, $1/d$; S_2 、 S_3 分别为氨氮和硝态氮的根系吸收系数, $1/d$ 。

模型采用 COMSOL 软件进行求解,利用了 COMSOL 中的理查兹方程和多孔介质稀物质传递 2 个模块进行耦合求解。根据水文地质概念模型,将地形数据输入 COMSOL,生成三维地形图,见图 2(b)。网格划分采用三角形网格划分,利用扫掠的方法创建了 2 672 个有效单元网格,见图 2(c)。

2.4 情景设定

根据水源地的灌溉施肥实际,从人工可控的方面(灌溉量、施肥量及作物类型),模拟不同情景下小沽河地下水硝酸盐富集的情况,同时预测未来 5 年正常施肥和不施肥情况下硝态氮的浓度,为水污染

带和饱和带进行完全耦合模拟,建立的耦合模型采用三维模型,COMSOL 中理查兹方程模块可用于描述变饱和和多孔介质流体运动,当有效饱和度 S_e 为 1 时,即可描述饱和带的水动力过程,实现非饱和带-饱和带耦合,方程为

$$\rho \left(\frac{C_m}{\rho g} + S_e S \right) \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \rho \left(-\frac{K_s}{\mu} k_r (\nabla p + \rho g \nabla D) \right) = Q_m \quad (3)$$

式中: S_e 为有效饱和度; S 为储水系数, $1/Pa$; K_s 为水力传导率, m/d ; k_r 为相对渗透率; p 为压力头, m ; C_m 为比容水度; D 为高程, m ; Q_m 为质量源项, $kg/(m^3 \cdot d)$ 。

溶质迁移转化基于对流-弥散方程来描述,方程中反应项考虑矿化、硝化、反硝化、氨挥发和根系吸收,氮素转化模型采用连续一阶反应偏微分方程来描述,即

调控提供科学依据。具体情景设定见表 1。

表 1 不同农田管理措施对氮素含量的影响模拟情景
Tab.1 Effects of different farmland management measures on nitrogen content simulation scenario

情景	控制条件			模拟时间/ d
	灌溉量/ ($m^3 \cdot hm^{-2}$)	施肥量/ ($kg \cdot hm^{-2}$)	作物类型	
W ₁	5 205.0	900	小麦-玉米	360
W ₂	4 684.5	900	小麦-玉米	360
W ₃	4 164.0	900	小麦-玉米	360
S ₁	5 205.0	675	小麦-玉米	360
S ₂	5 205.0	900	小麦-玉米	360
S ₃	5 205.0	1 125	小麦-玉米	360
Z ₁	5 205.0	900	小麦-玉米	360
Z ₂	7 080.0	6 300	蔬菜	360
正常施肥	5 205.0	900	小麦-玉米	2 160
不施肥	5 205.0	0	小麦-玉米	2 160

根据文献资料^[22],山东胶东半岛地区玉米采用井灌方式灌溉量为 $1 875 m^3/hm^2$,小麦灌溉量为 $3 330 m^3/hm^2$,年总灌溉量(W₁)为 $5 205 m^3/hm^2$ 。

在施肥量保持不变的情况下,灌溉量由常规灌水强度向下波动 10%、20%,即灌溉量 W_2 和 W_3 分别为 $4\ 684.5\ \text{m}^3/\text{hm}^2$ 、 $4\ 164\ \text{m}^3/\text{hm}^2$,此时玉米灌溉量分别为 $1\ 687.5\ \text{m}^3/\text{hm}^2$ 、 $1\ 500\ \text{m}^3/\text{hm}^2$,小麦灌溉量为 $2\ 997\ \text{m}^3/\text{hm}^2$ 、 $2\ 664\ \text{m}^3/\text{hm}^2$ 。在总灌溉量为 W_1 时,将施肥量上下波动 25%,即施肥量 S_1 、 S_2 和 S_3 分别为 $675\ \text{kg}/\text{hm}^2$ 、 $900\ \text{kg}/\text{hm}^2$ 及 $1\ 125\ \text{kg}/\text{hm}^2$,比较地下水中硝态氮浓度大小。考虑作物类型对硝态氮浓度的影响,要从灌溉量和施肥量两个因素出发。将作物改为蔬菜作物(Z_2)时,蔬菜所需的灌溉量和施肥量均有所增加,根据文献资料^[29],蔬菜每年灌溉量为 $7\ 080\ \text{m}^3/\text{hm}^2$,施肥量为 $6\ 300\ \text{kg}/\text{hm}^2$ 。在灌溉量为 W_1 、施肥量为 S_2 的情况下,设置 360 d 为模型预热期,预测未来 5 年内水位变化及硝态氮

的富集情况,同时模拟在不施肥条件下的硝态氮分布,将其结果和正常施肥结果进行对比。

3 结果与讨论

3.1 非饱和-饱和带水质模型的校验

利用 2018 年 6 月到 2019 年 5 月实际监测数据进行模型校验,采用均方根误差(RMSE)、标准平方根误差(NRMSE)和相对误差(RE)进行模拟效果的评价。一般模型计算结果 RMSE、NRMSE 和 RE 越接近于 0,说明模拟效果越好。图 3(a)展示了模型对水位的模拟效果,3(b)、3(c)展示了模型对硝态氮和氨氮的模拟效果,表 2 展示了水位、硝态氮和氨氮的模拟效果评价。

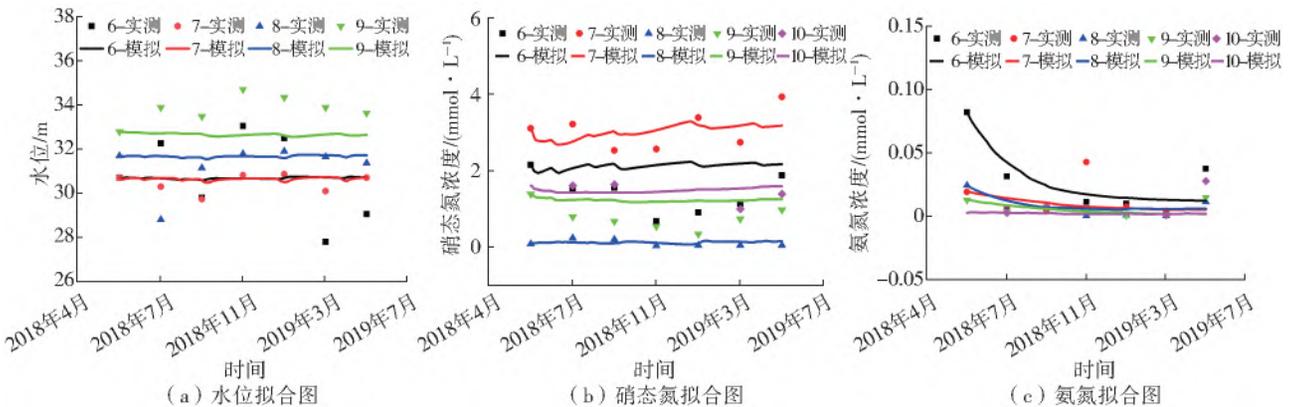


图 3 各监测点模拟值与实测值对比

Fig. 3 Comparison of simulated and measured values of each monitoring point

表 2 模拟效果评价

Tab. 2 Simulation effect evaluation table

采样点	水位			硝态氮			氨氮		
	RMSE	NRMSE	RE/%	RMSE	NRMSE	RE/%	RMSE	NRMSE	RE/%
6	0.06	0	-0.11	0.75	0.53	53.43	0	0.14	14.26
7	0.20	0.01	0.81	0.01	0	0.21	0.02	0.75	-74.47
8	0.48	0.02	1.63	0.02	0.20	20.09	0.01	0.37	37.42
9	1.14	0.03	-0.30	0.47	0.60	59.53	0	0.17	-16.55
10				0.09	0.06	7.04	0.01	1.70	-40.47
平均值	0.47	0.01	-0.17	0.31	0.33	33.31	0.01	0.36	-9.83

根据校验结果可以得出,水位各点的 RE 均低于 5%,RMSE 为 0.47,NRMSE 为 0.01,说明拟合效果较好,模型可以准确地模拟地下水水位的变化趋势^[30]。由图 3(a)可以看出,模拟的水位值较为平缓,但变化趋势与实测数据基本一致,其中采样点 6 和采样点 9 实测值变化浮动较大可能是受当地的地下水开采的影响,水位变化较大。

硝态氮的 RMSE 为 0.31、NRMSE 为 0.33、RE 为 33.31%,氨氮的 RMSE 为 0.01、NRMSE 为 0.36、RE 为 -9.83%,说明拟合效果较好,模型可

以准确模拟氮素的变化趋势。由图 3(b)可以看出,多数采样点实测值分布在模拟值的两侧,模拟值的变化趋势与实测值一致,但由于实际中土壤温度、pH 值及土地利用类型等因素会对氮素的迁移转化产生一定影响,因此,模拟结果与实测值之间会产生一定差异。其中采样点 6 和采样点 9 的模拟值比实测值略高;采样点 6 是由于该地区溶解氧含量高,模型反硝化速率常数设定较小,使得模拟值偏高;根据实地调查显示,采样点 9 附近存在未利用土地,实际施肥量少,淋溶到地下水中的硝态氮也减小,模拟值

比实际测量值偏高。由图 3(c)可以看出,氨氮浓度较小,且模拟值与实测值吻合程度较高,但也存在个别点有差异。采样点 7 的 11 月份的氨氮浓度较高,可能是由于该地区采样前进行了大量施肥,造成氨氮短时间较高的现象,采样点 6 和 10 在 5 月份的氨氮实测值比模拟值高,可能是由于该地区在 4 月底进行冬小麦追肥,实际施肥量较高,使实

测值浓度较高。整体来说,模拟结果变化趋势反映了实际情况,个别模拟误差来自建模过程中的概化处理。

率定得到的水流和溶质参数见表 3,其中矿化反应常数、硝化反应常数和反硝化反应常数进行了分区率定,表 3 中列出了整个研究区内的各参数率定结果。

表 3 研究区水文地质参数及反应参数率定结果

Tab. 3 Hydrogeological parameters and reaction parameters calibration results of the study area

分区编号	层号	渗透系数	饱和含水率	残余含水率	纵向弥散度/m	横向弥散度/m	矿化反应常数/d ⁻¹	硝化反应常数/d ⁻¹	反硝化反应常数/d ⁻¹
I	上层	0.55	0.34	0.08	20	6	0.008	0.056	0.001
	下层	4.32	0.49	0.02	20	6	0.003	0.028	0.001
II	上层	0.55	0.34	0.08	20	6	0.008	0.056	0.001
	下层	4.32	0.49	0.02	20	6	0.003	0.051	0.004
III	上层	0.55	0.34	0.08	20	6	0.008	0.056	0.001
	下层	4.32	0.49	0.02	20	6	0.006	0.021	0.008
IV	上层	0.55	0.34	0.08	20	6	0.008	0.056	0.001
	下层	4.32	0.49	0.02	20	6	0.006	0.028	0.004
V	上层	0.55	0.34	0.08	20	6	0.008	0.056	0.001
	下层	4.32	0.49	0.02	20	6	0.006	0.034	0.004

3.2 研究区水位及氮素时空变化分析

3.2.1 水位变化分析

利用建立的非饱和带-饱和带耦合模型模拟了一年内的水位、硝态氮及 DON 的迁移转化过程,模型模拟的水位季节变化和分布见图 4,分别为 2018 年 6 月初至 2019 年 5 月底的模拟结果。从图

中可以看出:整个研究区内上游水位较下游水位高 2 m 左右;2018 年 6 月初到 10 月呈波动下降趋势。其中:水位波动减小时刻为抽水灌溉时间,10 月到次年 1 月水位升高,1 月底进行灌溉,水位降低;随后水位回升,4 月底抽水灌溉,水位降低。

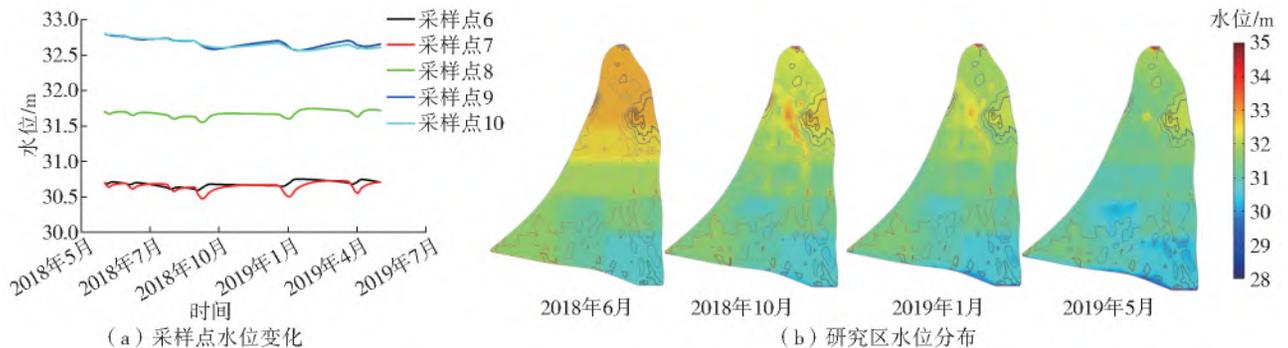


图 4 水位模拟结果

Fig. 4 Diagram of water level simulation results

地下水位的波动范围与季节变化及农田活动有密切关系,研究区农田灌溉水源为地下水,当处于农田灌溉季节时,地下水开采量增加,水位呈现下降趋势。同时降雨和蒸发对水位也会产生一定的影响,模拟期 2018 年 6 月初、7 月初和 8 月底,此时为夏玉米灌溉时间,灌溉量增加,抽水开采也增加,地下水损失增加,使地下水位有小幅下降;8 月到 10 月由于蒸发量较大,地下水位整体呈现下降趋势,且

10 月初为冬小麦灌溉时间,地下水位降低量较大,在 10 月份达到最低点;10 月份到次年 1 月份蒸发量逐渐减小,同时对地下水的开采量较少,地下水位逐渐上升;模拟期 1 月底对冬小麦抽水灌溉,此时地下水水位呈现下降趋势;2 月至 3 月,降雨量比 1 月增加,水位呈升高趋势;4 月至 5 月,由于春灌使得农业灌溉量增加,地下水开采量增加,地下水位较之前降低,灌溉期过后水位逐渐回升。由等水位线图

4(b)可以看出,各区域水位变化基本一致但变幅略有差异,其中1月至5月南部水位下降比其他区域大,可能是由于南部处于地下水运动的下游,受上游和下游抽水的叠加影响。

3.2.2 硝态氮的迁移转化分析

分别在研究区内采样监测点的非饱和带和饱和带中各选取 1 个点,得到硝态氮浓度变化结果,见图 5。从图 5 可以看出,非饱和带中硝态氮浓度比地下水硝态氮浓度略高,说明土壤中会残留部分硝态氮。从 6 月初开始,非饱和带和地下水中硝态氮浓度在一定的范围内波动变化,且浓度变化基本一致。硝态氮浓度变化与施肥时间成密切相关关系。从 6 月到 10 月在种植夏玉米过程中施用氮肥,肥料经过一系列转化过程转化为硝酸盐进入地下水中,地下水中硝态氮浓度逐渐升高。10 月初种植冬小麦,冬小麦播种前施入约 34% 氮肥,剩余 66% 氮肥分别在冬

小麦返青期和拔节期施加。10 月初施肥后,非饱和带中硝态氮浓度增加,地下水中硝态氮浓度也逐渐增加,1 月底在冬小麦返青期施肥,随后地下水硝态氮浓度增加,由于 2 到 3 月份期间未施肥,由图 5(f) 可以看出 3 月底硝态氮浓度较低。4 月初时在冬小麦拔节期对作物进行追肥,促进生长,进而造成硝态氮浓度逐渐升高的现象。从图 5(f) 还可以看出,不同地点的硝态氮浓度差异也较大,采样点 6、7 的硝态氮浓度较高,而采样点 8 则较低。造成硝态氮浓度高的原因是采样点 6、7 附近地下水中溶解氧含量高,反硝化作用弱,反硝化反应常数在该区域设定较小,硝态氮产生累积作用,浓度升高。研究区上游边界(北部)以外无农业活动,没有氮源输入,研究区内上下游都有氮源输入,水流从上游流至下游,地下水中硝态氮在流动过程中累积,因此下游的硝态氮浓度高于上游地区。

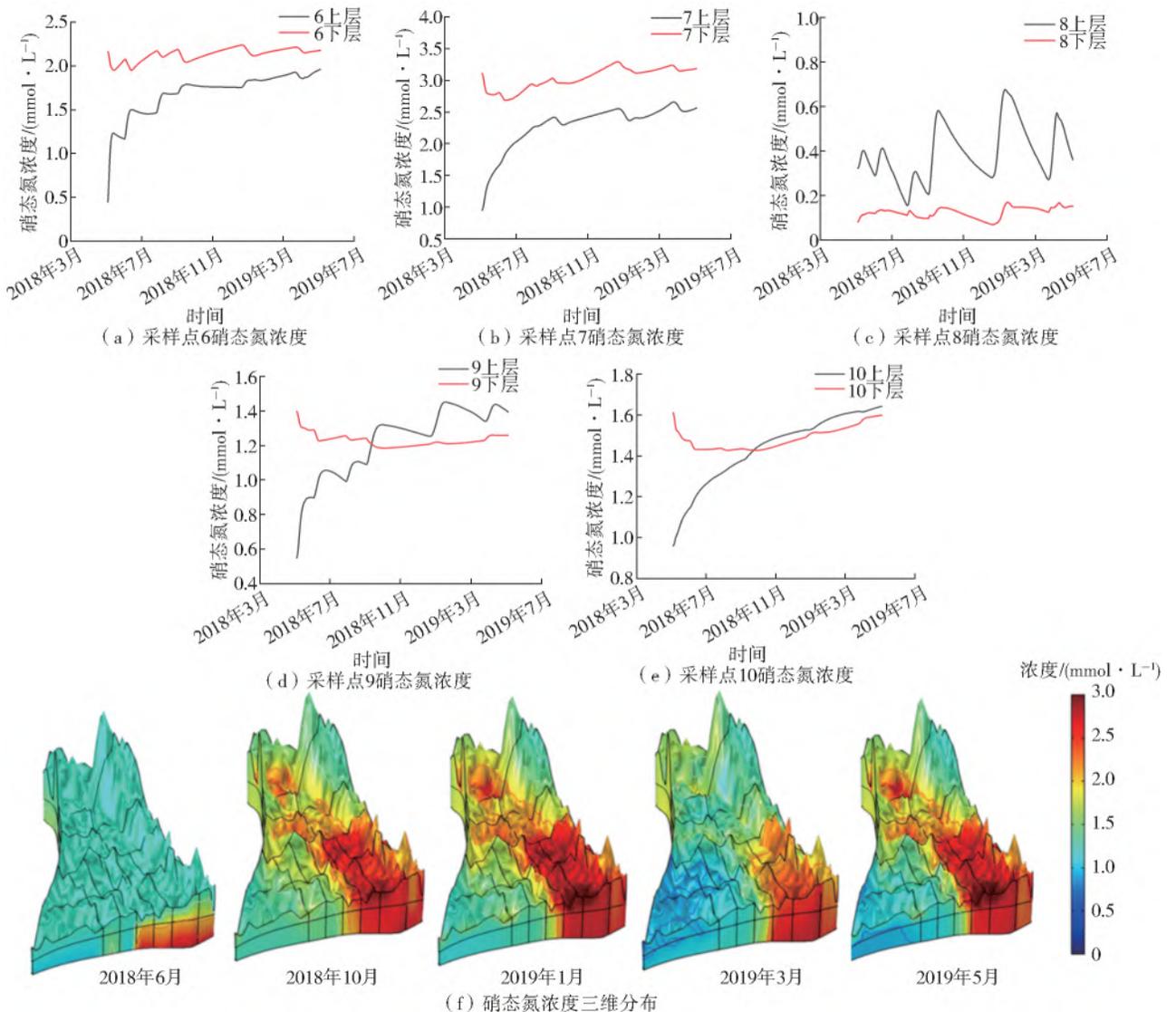


图 5 硝态氮浓度模拟结果

Fig. 5 Simulation results of nitrate nitrogen concentration

3.2.3 氨氮的迁移转化分析

氨氮浓度的变化结果见图6。从图中可以看出,研究区内氨氮浓度较低,浓度变化也不大,各采样点变化趋势较为一致,呈现先降低后略有升高的趋势。由于氨氮的吸附性强并易发生硝化反应,氨氮在非饱和带和地下水中浓度都比较低。非饱和带氨氮浓度比地下水中氨氮浓度略高,是由于向下迁移过程中氨氮易被吸附,因此氨氮的浓度随深度增

加逐渐降低。采样点6的地下水氨氮初始浓度设置偏高,原因是设定初始浓度的实测值较高,但该数据高于其他时段的测量值,可能存在测量误差,该初始设置使前几个月采样点6的地下水氨氮模拟浓度偏高。从图6(f)可以看出氨氮浓度也呈现上游地区比下游氨氮浓度低的情况,与硝态氮的分布情况一致。

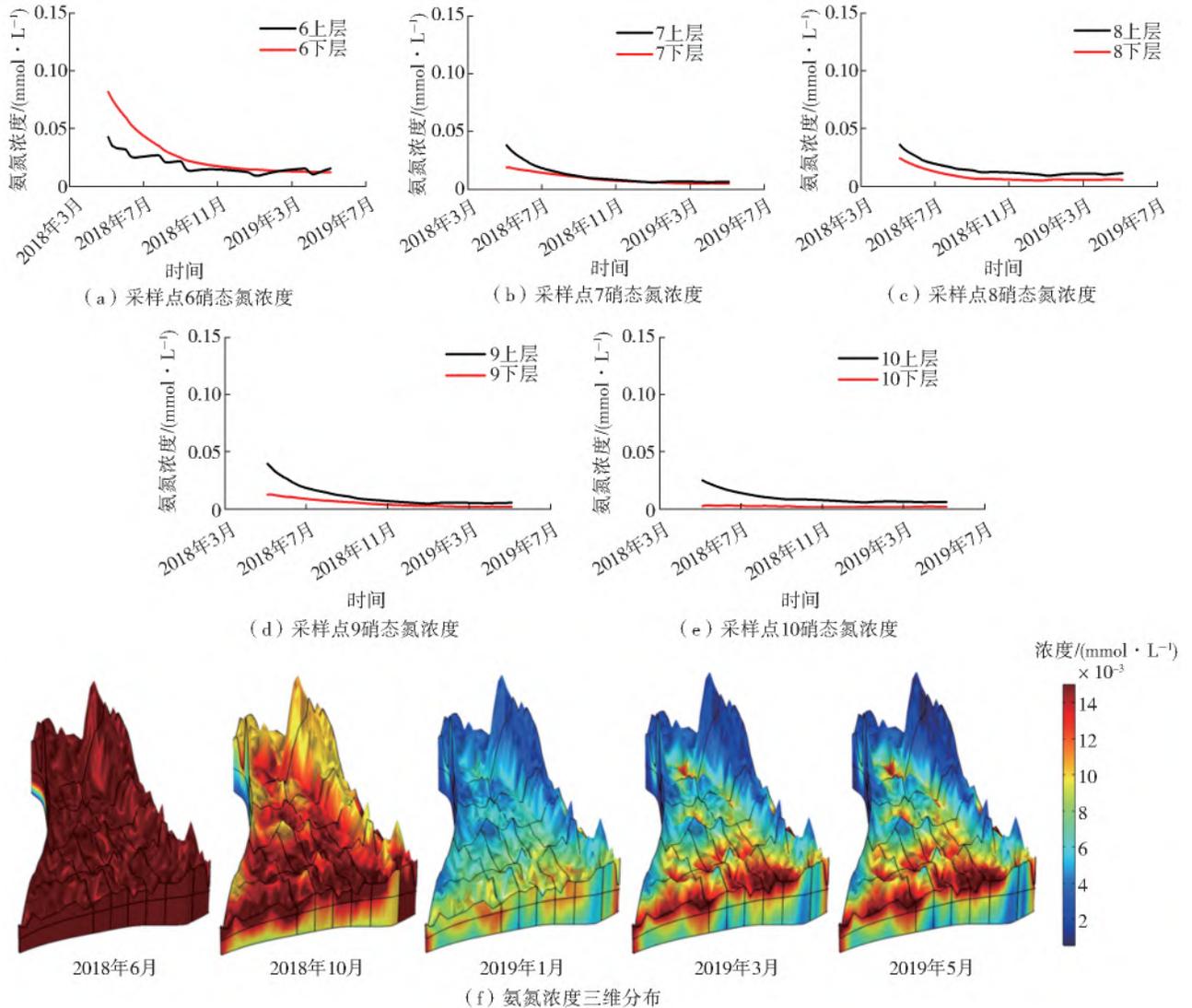


图6 氨氮浓度模拟结果

Fig. 6 Simulation results of ammonia nitrogen concentration

3.2.4 DON 的迁移转化分析

图7为DON浓度的三维模拟结果,由图7可知DON浓度随时间波动,DON浓度变化与施肥时间呈密切相关关系:2019年3月份浓度最低,说明前期施加的DON已基本转化为硝态氮或氨氮;2019年5月份由于化肥的施用,DON浓度增加。在垂向DON随水流向下运移,随着深度增加浓度逐渐降低。

3.3 不同农田管理措施对氮素迁移转化的影响

3.3.1 灌溉量

利用建立的耦合模型分别模拟灌溉量 W_1 、 W_2 和 W_3 为 $5\ 205\ \text{m}^3/\text{hm}^2$ 、 $4\ 684.5\ \text{m}^3/\text{hm}^2$ 和 $4\ 164\ \text{m}^3/\text{hm}^2$ 水位及硝态氮浓度变化,见图8。当抽水灌溉量降低10%时,水位平均升高0.04 m,硝态氮浓度平均降低0.040 mmol/L(2.17 mg/L,括号内为质量浓度,下

同), 氨氮浓度平均降低 0.001 mmol/L(0.02 mg/L); 灌溉量降低 20% 时, 水位平均升高 0.06 m, 硝态氮浓度平均降低 0.050 mmol/L(2.98 mg/L), 氨氮浓度平均降低 0.002 mmol/L(0.03 mg/L)。当抽水灌溉量降低时, 地下水开采量减小, 灌溉损失减小, 所以地下水

位会出现上升的情况。开始地下水中硝态氮的浓度升高是因为随着灌溉量减小, 抽水带出的硝态氮总量减小, 因此硝态氮的损失减小浓度升高, 10 月后硝态氮浓度减小说明此时水位高时对硝态氮产生稀释作用大于硝态氮损失的影响。氨氮浓度受灌溉量影响较小。

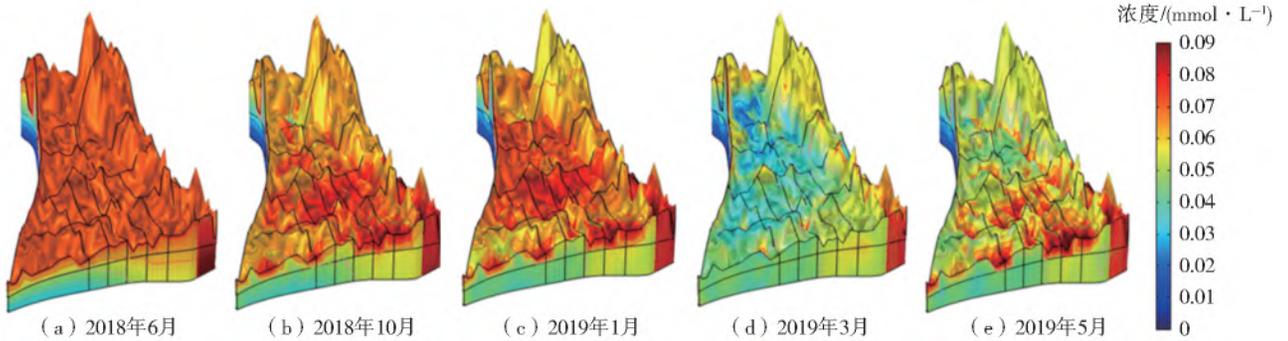


图 7 DON 浓度模拟结果三维分布

Fig. 7 Three-dimensional distribution of DON concentration simulation results

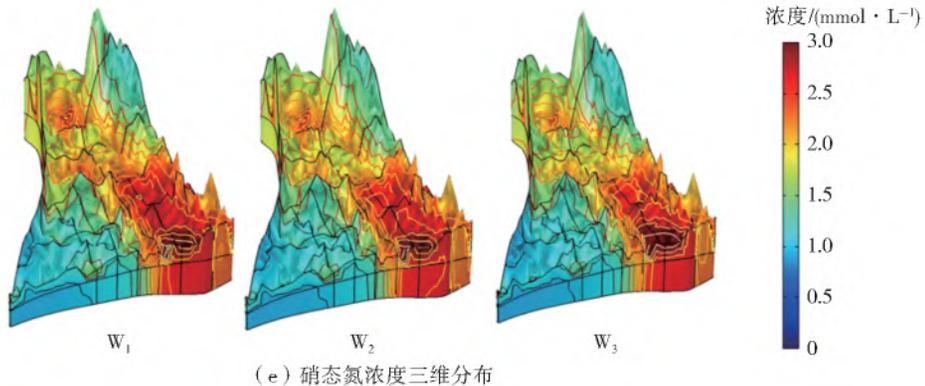
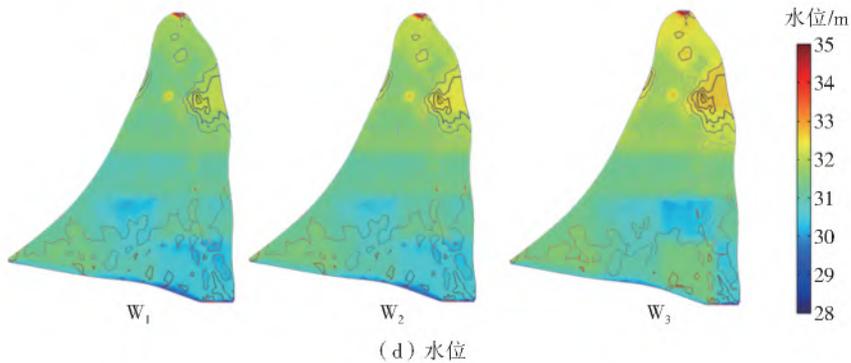
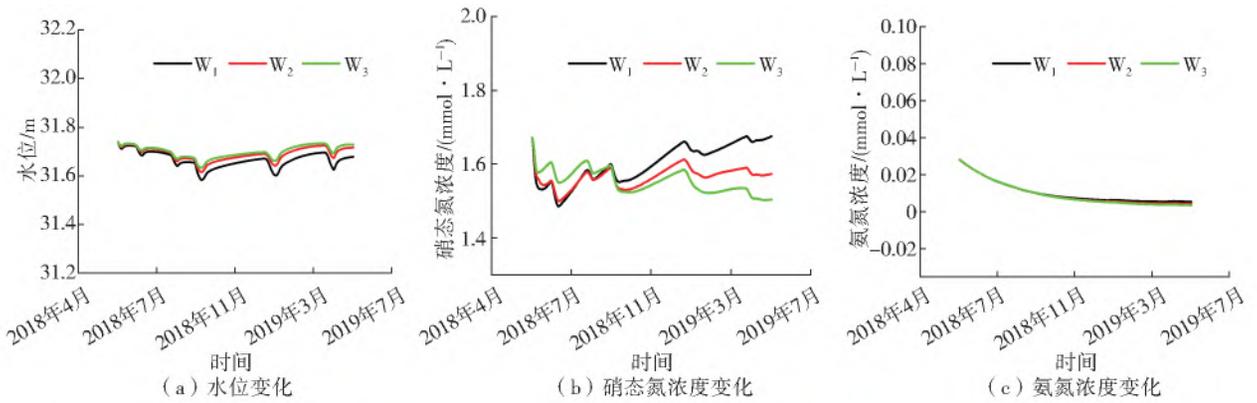


图 8 不同灌溉量 W_1 、 W_2 和 W_3 分别为 $5\ 205\ \text{m}^3/\text{hm}^2$ 、 $4\ 684.5\ \text{m}^3/\text{hm}^2$ 和 $4\ 164\ \text{m}^3/\text{hm}^2$ 模拟结果

Fig. 8 Simulation results under different irrigation amount W_1 , W_2 and W_3 of $5\ 205\ \text{m}^3/\text{hm}^2$, $4\ 684.5\ \text{m}^3/\text{hm}^2$ and $4\ 164\ \text{m}^3/\text{hm}^2$

3.3.2 施肥量

利用耦合模型模拟施肥量 S_1 、 S_2 和 S_3 分别为 675 kg/hm^2 、 900 kg/hm^2 和 $1\,125 \text{ kg/hm}^2$ 时对地下水中硝态氮浓度的影响,结果见图 9。从图 9 可以看出,当施肥量增加后,地下水中硝态氮的浓度也随之增加:当施肥量增加 25% 时,硝态氮浓度年平均增加 0.040 mmol/L (2.60 mg/L),氨氮浓度年平均增加 0.001 mmol/L (0.02 mg/L);当施

肥量降低 25% 时,硝态氮浓度年平均降低 0.050 mmol/L (3.16 mg/L),氨氮浓度年平均降低 0.001 mmol/L (0.02 mg/L)。当施肥量增加和减少相同量时,施肥量减少情景对硝态氮浓度变化影响较大,并且地下水中硝态氮浓度的增加量和施肥增加量并不是线性关系,说明当过量施肥时,肥料没有完全转化为硝态氮。施肥量变化对氨氮浓度影响较小。

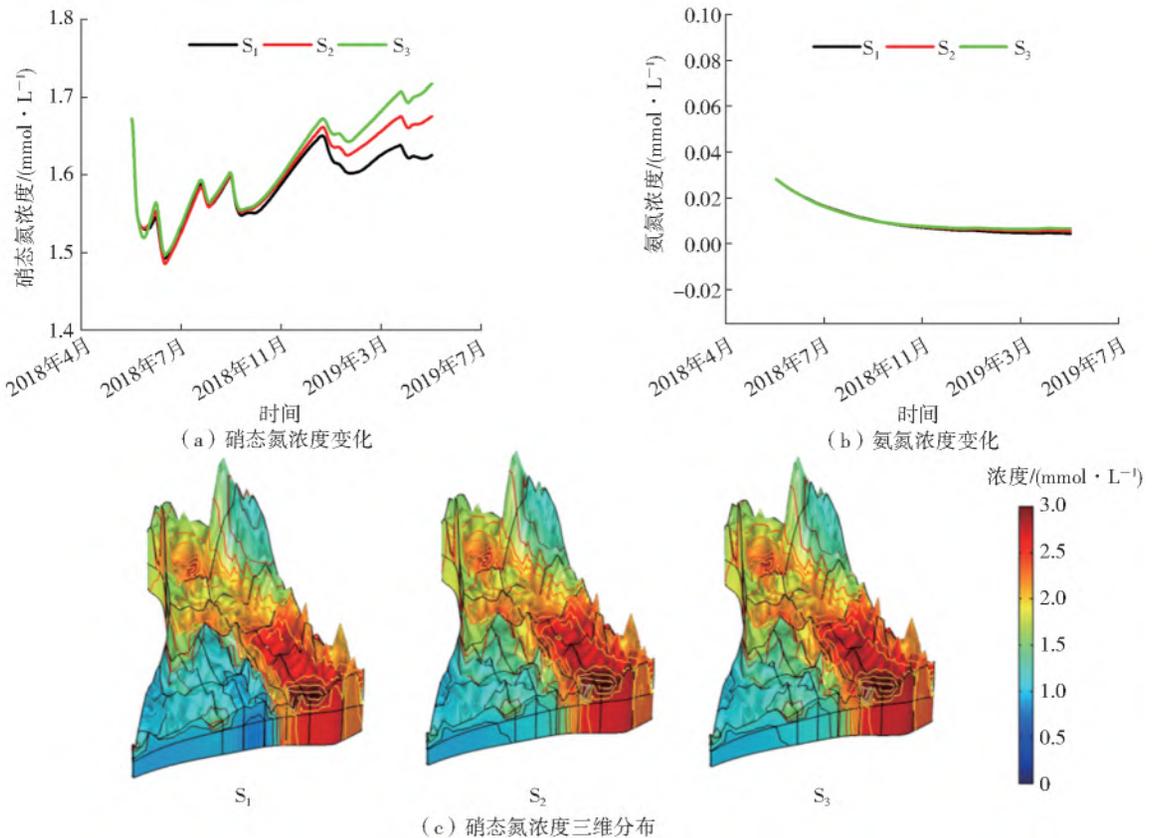


图 9 不同施肥量 S_1 、 S_2 和 S_3 分别为 675 kg/hm^2 、 900 kg/hm^2 和 $1\,125 \text{ kg/hm}^2$ 模拟结果

Fig. 9 Simulation results under different fertilization amount S_1 , S_2 and S_3 of 675 kg/hm^2 , 900 kg/hm^2 and $1\,125 \text{ kg/hm}^2$

3.3.3 作物类型

将作物改为蔬菜,此时灌溉量为 $7\,080 \text{ m}^3/\text{hm}^2$,施肥量为 $6\,300 \text{ kg/hm}^2$,增大作物根系吸收系数,模拟结果见图 10。由图 10 可以看出,种植蔬菜时水位会比种植夏玉米-冬小麦略低,约低 0.05 m 。蔬菜作物的抽水灌溉量比夏玉米-冬小麦增加 36%,地下水开采量增加,灌溉过程中水量损失也相应增加,进而造成地下水水位下降。种植蔬菜作物时施肥量是种植夏玉米-冬小麦轮作施肥量的 7 倍,地下水中硝态氮浓度年平均增加 0.390 mmol/L (23.93 mg/L),氨氮浓度年平均增加 0.016 mmol/L (0.29 mg/L)。开始时由于开采量增加,抽水使地下水中硝态氮和氨氮含量减小,浓度降低,10 月初后由于增加的施肥量逐渐淋溶到地下水中,地下

水中硝态氮和氨氮浓度显著升高,模拟期最后时刻为硝态氮浓度和氨氮差值最大时间,硝态氮浓度增加 1.140 mmol/L (70.68 mg/L),氨氮浓度增加 0.033 mmol/L (0.60 mg/L),此时非饱和带 DON 浓度是种植夏玉米-冬小麦浓度的 2.25 倍,说明在短时间内增加施肥量,施加的肥料没有完全转化淋溶到地下水中,绝大部分残留在非饱和带中。因此,种植作物改为蔬菜时,地下水中硝态氮和非饱和带 DON 浓度显著增加,会加重研究区地下水氮污染。

3.4 硝态氮富集情况预测

利用建立的耦合模型模拟未来 5 年正常施肥和不施肥情况下的硝态氮富集情况,预测见图 11。从图 11 可以看出,水头在 5 年内呈波动变化,总体水

头基本保持不变。在正常施肥情况下,硝态氮的浓度是逐渐缓慢累积增长的,5 年平均总增加量为 0.220 mmol/L(13.64 mg/L)。如果不施肥,由于没有硝态氮的输入,并且反硝化作用持续消耗硝态氮,地下水中硝态氮的浓度持续降低,5 年平均总降低量为 0.540 mmol/L(33.48 mg/L)。正常施肥与

不施肥情景相比,硝态氮浓度相差 0.760 mmol/L(47.12 mg/L)。可以看出,在没有农业污染源输入的情况下,各区域硝态氮含量均比正常施肥情景小,尤其是东南部地区硝态氮浓度比正常施肥情景有明显改善。

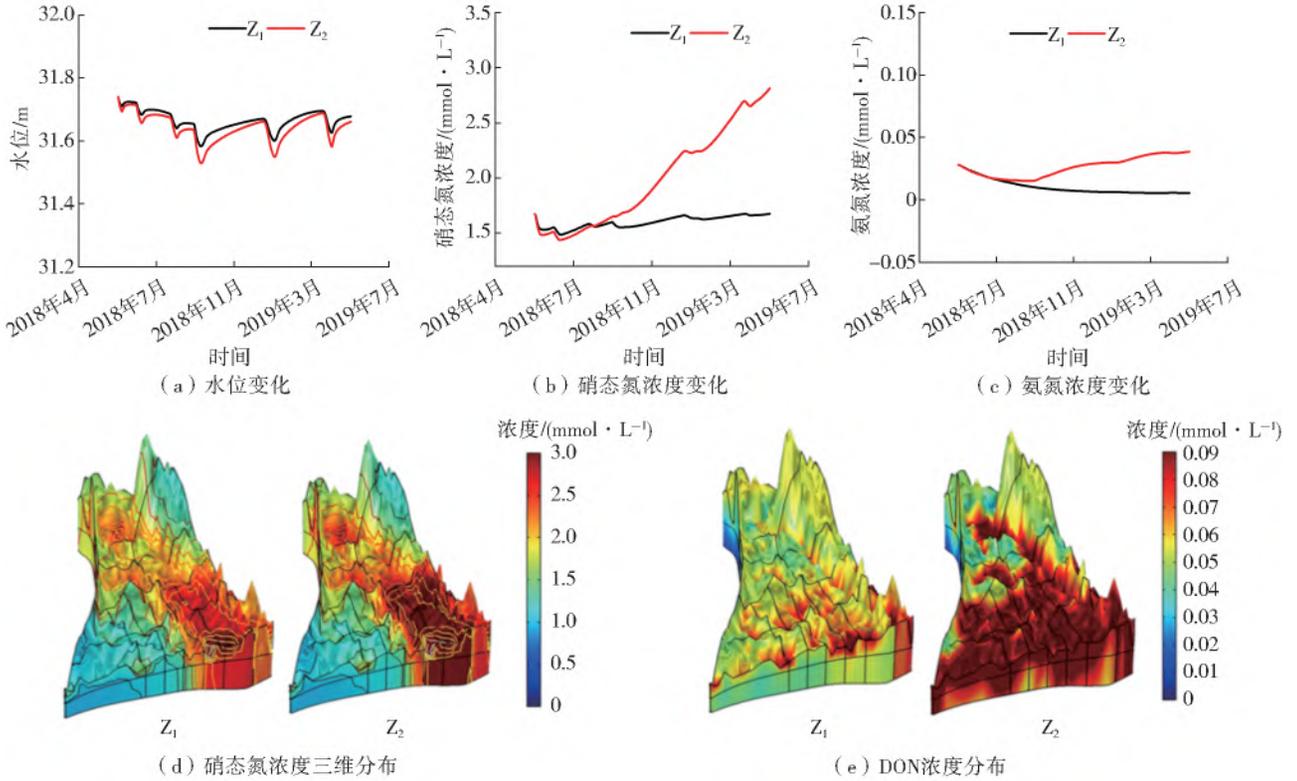


图 10 不同作物类型(夏玉米-冬小麦 Z_1 、蔬菜 Z_2)模拟结果

Fig. 10 Simulation results under different crop types a summer maize-winter wheat (Z_1), vegetables (Z_2)

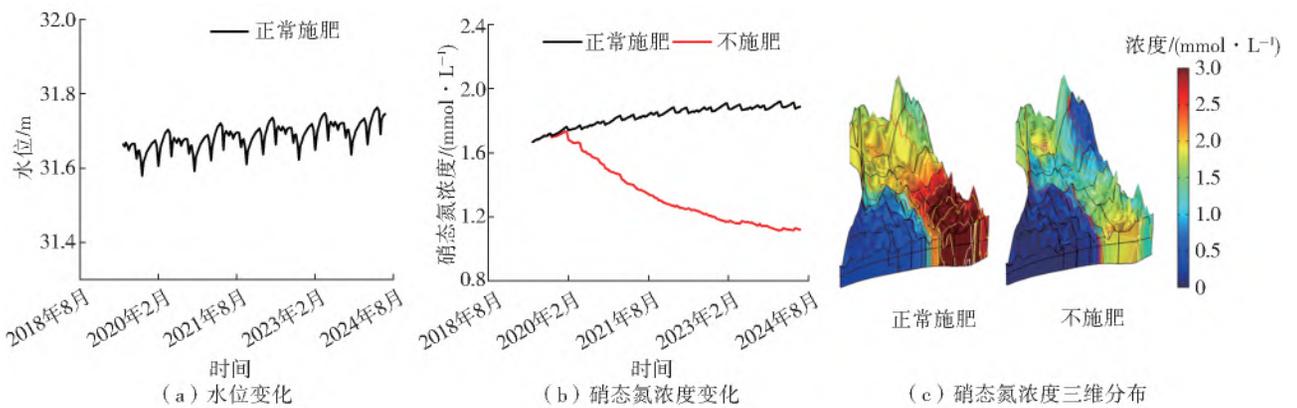


图 11 正常施肥及不施肥条件下 5 年模拟结果

Fig. 11 Simulation results under normal fertilization and no fertilization for 5 years

4 结论

(1)建立了考虑溶质反应的非饱和带-饱和带完全耦合溶质数值模型,结合实测数据,验证了耦合模型的可行性,弥补了现有完全耦合模型不考虑溶质反应的缺陷。

(2)根据模型模拟结果,研究区一年内灌溉量分别减小 10%和 20%时,水位平均升高 0.04、0.06 m,硝态氮质量浓度降低 2.17、2.98 mg/L,氨氮质量浓度降低 0.02、0.03 mg/L;当施肥量分别增加 25%、降低 25%时,地下水中硝态氮质量浓度分别增加 2.60 mg/L、降低 3.16 mg/L,氨氮质量浓度分别增

加 0.02 mg/L、降低 0.02 mg/L,硝态氮质量浓度增加量和施肥量增加量并非线性关系;将夏玉米-冬小麦轮作农田改植蔬菜后硝态氮质量浓度年平均升高 23.93 mg/L,氨氮质量浓度年平均增加 0.29 mg/L,并在非饱和带中残留大量 DON。

(3)根据长期模拟结果,正常施肥情景下地下水中硝态氮质量浓度会逐年增加,5年总增加量为 13.64 mg/L,不施肥情景下硝态氮质量浓度逐年降低,5年总降低量为 33.48 mg/L。

参考文献(References):

- [1] 刘贯群,周书玉,黄修东,等.多种方法识别青岛大沽河平原区地下水硝酸盐污染来源[J].环境科学学报,2017,37(1):347-356. (LIU G Q, ZHOU S Y, HUANG X D, et al. Multiple methods to recognize sources of underground water nitrate contamination in plain area of Dagu River, Qingdao, China[J]. Acta Scientiae Circumstantiae, 2017, 37(1): 347-356. (in Chinese)) DOI:10.13671/j.hjkxxb.2016.0163.
- [2] JIA X, O'CONNOR D, HOU D, et al. Groundwater depletion and contamination: spatial distribution of groundwater resources sustainability in China[J]. Science of The Total Environment, 2019, 672: 551-562. DOI:10.1016/j.scitotenv.2019.03.457.
- [3] ZGHIBI A, TARHOUNI J, ZOUHRI L. Assessment of seawater intrusion and nitrate contamination on the groundwater quality in the Korba coastal plain of Cap-Bon (northeast of Tunisia) [J]. Journal of African Earth Sciences, 2013, 87: 1-12.
- [4] GARZON VIDUEIRA R, RIAL OTERO R, GARCIA-NOCELO M L, et al. Identification of nitrates origin in Limia River basin and pollution-determinant factors [J]. Agriculture, Ecosystems & Environment, 2020, 290: 1-12. DOI:10.1016/j.agee.2019.106775.
- [5] 查元源.饱和-非饱和水流运动高效数值算法研究及应用[D].武汉:武汉大学,2014. (ZHA Y Y. Research and application of efficient numerical algorithm for saturated-unsaturated flow motion [D]. Wuhan: Wuhan University, 2014. (in Chinese))
- [6] TESTONI R, LEVIZZARI R, DE SALVE M. Coupling of unsaturated zone and saturated zone in radionuclide transport simulations[J]. Progress in Nuclear Energy, 2017, 95: 84-95. DOI: 10.1016/j.pnucene.2016.11.012.
- [7] FACCHI A, ORTUANI B, MAGGI D, et al. Coupled SVAT-groundwater model for water resources simulation in irrigated alluvial plains[J]. Environmental Modelling & Software, 2004, 19(11): 1053-1063.
- [8] HUAN H, HU L, YANG Y, et al. Groundwater nitrate pollution risk assessment of the groundwater source field based on the integrated numerical simulations in the unsaturated zone and saturated aquifer[J]. Environment International, 2020, 137: 1-10. DOI: 10.1016/j.envint.2020.105532.
- [9] IVORY C F. Several hydrodynamic instabilities illustrated using COMSOL Multiphysics [R]. Proceedings of the 2018 COMSOL Conference in Boston, 2018.
- [10] SINGH A K, PILZ P, ZIMMER M, et al. Numerical simulation of tracer transport in the Altmark gas field [J]. Environmental Earth Sciences, 2012, 67(2): 537-548.
- [11] HWANG H T, PARK Y J, FREY S K, et al. A simple iterative method for estimating evapotranspiration with integrated surface/subsurface flow models [J]. Journal of Hydrology, 2015, 531: 949-959. DOI: 10.1016/j.jhydrol.2015.10.003.
- [12] JONES J P, SUDICKY E A, MCLAREN R G. Application of a fully-integrated surface-subsurface flow model at the watershed-scale: A case study [J]. Water Resources Research, 2008, 44(3): 1-13.
- [13] MAXWELL R M, PUTTI M, MEYERHOFF S, et al. Surface-subsurface model intercomparison: A first set of benchmark results to diagnose integrated hydrology and feedbacks [J]. Water Resources Research, 2014, 50(2): 1531-1549.
- [14] LIGGETT J E, PARTINGTON D, FREI S, et al. An exploration of coupled surface-subsurface solute transport in a fully integrated catchment model [J]. Journal of Hydrology, 2015, 529: 969-979. DOI: 10.1016/j.jhydrol.2015.09.006.
- [15] 张亮,姚磊华,王迎东.基于COMSOL Multiphysics的三维地质建模方法[J].煤田地质与勘探,2014,42(6):14-19. (ZHANG L, YAO L H, WANG Y D. 3D geological modeling method based on COMSOL Multiphysics [J]. Coal Geology & Exploration, 2014, 42(6): 14-19. (in Chinese))
- [16] 张彬,李卫明,封帆,等.基于COMSOL的地下水封油库围岩流固耦合特征模拟研究[J].工程地质学报,2012,20(5):789-795. (ZHANG B, LI W M, FENG F, et al. Numerical simulation for fluid-solid coupling characteristics in surrounding rock of underground water-sealed oil storage based on COMSOL [J]. Journal of Engineering Geology, 2012, 20(5): 789-795. (in Chinese))

- [17] 刘建霞,袁西龙. 青岛大沽河水源地地下水水质的数值模型预测[J]. 海洋地质动态,2006,22(2):9-14,38-39. (LIU J X, YUAN X L. Application of numerical modeling to predication of water quality in Dagu River groundwater source area, Qingdao[J]. Marine Geology Letters, 2006, 22 (2): 9-14, 38-39. (in Chinese))
- [18] XIONG G, AN Q, FU T. Evolution analysis and environmental management of intruded aquifers of the Dagu River basin of China[J]. Science of The Total Environment, Elsevier, 2020, 719: 1-14. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2020.137260.
- [19] 王平,韩占涛,张海领,等. 某氨氮污染地下水抽出-处理系统优化模拟研究[J]. 水文地质工程地质, 2020,47(3):34-43. (WANG P, HAN Z T, ZHANG H L, et al. Simulation and optimization of a pumping and treating system for the remediation of ammonia polluted groundwater[J]. Hydrogeology & Engineering Geology, 2020, 47(3):34-43. (in Chinese)) DOI: 10.16030/j.cnki.issn.1000-3665.201907053.
- [20] 张丹,张广涛,王丽学,等. 彭曼-蒙特斯公式在参考作物需水量中的应用研究[J]. 安徽农业科学,2006,34(18):4513-4514. (ZHANG D, ZHANG G T, WANG L X, et al. Research on the equation of Penman-Montes in reference crop evaporation [J]. Journal of Anhui Agricultural Sciences, 2006, 34 (18): 4513-4514. (in Chinese))
- [21] 康绍忠,蔡焕杰. 农业水管理学[M]. 北京:中国农业出版社,1996. (KANG S Z, CAI H J. Agricultural Water Management[M]. Beijing: China Agricultural Press, 1996. (in Chinese))
- [22] DB 37/T 1640. 1—2015, 山东省主要灌溉农作物定额[S]. (DB 37/T 1640. 1-2015, Irrigation quota of main crop in Shandong Province[S]. (in Chinese))
- [23] 中华人民共和国农业农村部,小麦、玉米、水稻三大粮食作物的区域大配方与施肥建议(2013) [EB/OL]. http://www.moa.gov.cn/nybg/2013/dbaq/201712/t20171219_6119839.htm, 2013-08-20. (Ministry of Agriculture and Rural Affairs of the People's Republic of China, The regional formulation and fertilization suggestion of wheat, maize and rice (2013) [EB/OL]. http://www.moa.gov.cn/nybg/2013/dbaq/201712/t20171219_6119839.htm, 2013-08-20. (in Chinese))
- [24] SIMUNEK J, ŠEJNA M, SAKAI M, 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 [M]. California: Department of Environmental Sciences, 2013.
- [25] 陈卫金,程东会,陶伟. Van Genuchten 模型参数的物理意义[J]. 水文地质工程地质, 2017, 44(6): 147-153. (CHEN W J, CHENG H D, TAO W. Physical significance of the parameters in the Van Genuchten model [J]. Hydrogeology & Engineering Geology, 2017, 44(6): 147-153. (in Chinese)) DOI: 10.16030/j.cnki.issn.1000-3665.2017.06.22.
- [26] 扈剑琨,姬永红. 基于水均衡原理的北方隐伏岩溶含水层参数求取方法[J]. 治淮, 2020(3): 13-15. (HU J K, JI Y H. A method for calculating the parameters of buried karst aquifer in the north based on the principle of water equilibrium[J]. ZHI HUI, 2020(3): 13-15. (in Chinese)) DOI: 10.3969/j.issn.1001-9243.2020.03.007.
- [27] 张焘. 青岛大沽河干流地下水主要污染物的污染预测[D]. 青岛:中国海洋大学,2014. (ZHANG T. Pollution prediction of main pollutants in groundwater of Dagu River trunk stream in Qingdao[D]. Qingdao: Ocean University of China, 2014. (in Chinese))
- [28] 裴源生,李旭东,赵勇,等. 华北典型地下水大深埋区潜水层垂向补给特征及其给水度[J]. 南水北调与水利科技(中英文), 2020, 18(1): 176-193. (PEI Y S, LI X D, ZHAO Y, et al. Research on vertical recharge and specific yield of the unconfined aquifer in a typical deep groundwater areas of North China Plain [J]. South-to-North Water Transfers and Water Science & Technology, 2020, 18(1): 176-193. (in Chinese)) DOI: 10.13476/j.cnki.nsbdkq.2020.0019.
- [29] 江丽华,李妮,徐钰,等. 山东省设施蔬菜施肥现状调查研究[J]. 山东农业科学, 2020, 52(2): 90-96. (JIANG L H, LI N, XU Y, et al. Investigation and research on current status of fertilization for facility vegetable of Shandong Province [J]. Shandong Agricultural Sciences, 2020, 52(2): 90-96. (in Chinese)) DOI: 10.14083/j.issn.1001-4942.2020.02.016.
- [30] 任智丽,路明,孙小双. 会仙湿地岩溶地下水数值模拟[J]. 南水北调与水利科技(中英文), 2020, 18(5): 157-164. (REN Z L, LU M, SUN X S. Numerical simulation of karst groundwater in Huixian wetland [J]. South-to-North Water Transfers and Water Science & Technology, 2020, 18(5): 157-164. (in Chinese)) DOI: 10.13476/j.cnki.nsbdkq.2020.0105.

Numerical simulation of nitrogen transportation and transformation in fully coupled unsaturated-saturated zones

SUN Xiaowen¹, PENG Hui^{1,2}(1. *College of Environmental Science and Engineering, Ocean University of China, Qingdao 266100, China;*2. *Key Laboratory of Marine Environment and Ecology, Ministry of Education,**Ocean University of China, Qingdao 266100, China)*

Abstract: The Shandong Peninsula has become one of the most serious nitrate pollution region in China. Excess fertilization in the surface is a main reason of groundwater nitrate pollution. Because of the complex transportation and transformation processes of nitrogen in the unsaturated zone and saturated zone, numerical models can be served as useful tool to understand the influences of fertilization on groundwater pollution. The studies of fully coupled unsaturated-saturated model with reactions is lacked at present.

A three-dimensional fully coupled unsaturated-saturated numerical model of groundwater dynamic and solute transport was established. The reaction processes of nitrogen mineralization, nitrification and denitrification were added in the model, and COMSOL was used to solve the model. The model was applied to the Xiaogu River area of Shandong Peninsula, and verified by the monitoring data of groundwater level and nitrogen concentrations. Several scenarios of different pumping irrigation amounts, fertilizing amounts and crop types were simulated to analyze their influences on distribution of nitrogen in groundwater. The long-term enrichment process of nitrogen in groundwater was also predicted by the model.

The results showed that the fully coupled unsaturated-saturated model could accurately simulate the groundwater dynamics and solute transportation-transformation process. Under normal irrigation and fertilization conditions, the water level changes were closely related to seasonal changes and agriculture activities, and the concentrations of nitrate and DON in groundwater were closely related to the fertilization time. When the pumping irrigation amount decreased 10% and 20%, the water level increased 0.04 m and 0.06 m on average, and the nitrate mass concentration decreased 2.17 mg/L and 2.98 mg/L, and the ammonia nitrogen mass concentration decreased 0.02 mg/L and 0.03 mg/L, respectively. When the fertilization increased 25% and decreased 25%, nitrate mass concentration in groundwater increased 2.60 mg/L and decreased 3.16 mg/L, and the ammonia nitrogen mass concentration increased 0.02 mg/L and decreased 0.02 mg/L, respectively. There was no linear relationship between the increase of nitrate mass concentration and the increase of the fertilization. When the summer corn-winter wheat rotation farmland was changed to vegetable farmland, the nitrate mass concentration increased 23.93 mg/L, and the ammonia nitrogen mass concentration increased 0.29 mg/L and a large amount of DON remained in the soil layer. Under long term normal fertilization conditions, the nitrate mass concentration gradually increased, the average increase in 5 years was 13.64 mg/L. On the contrary, under long term no fertilization conditions, the nitrate mass concentration decreased 33.48 mg/L in 5 years. Without the input of agricultural pollution sources, the nitrate mass concentrations of each region were lower than that of normal fertilization scenarios, especially in the southeast region.

It was showed that the pumping irrigation and fertilization influence the groundwater nitrate pollution, which could provide valuable scientific reference for groundwater resource managements and water pollution control. In future studies, the model can be applied to different regions and more farmland management measures can be simulated to show their influences on groundwater nitrogen pollution.

Key words: unsaturated-saturated zone; fully coupled; nitrogen transportation; COMSOL; numerical simulation; pollution forecast