

团 体 标 准

XXXX—XXXX

土壤有机污染物包气带垂直淋溶浓度 衰减系数估算技术指南

Technical guidelines for estimating concentration reduction factor of soil organic
pollutants during leaching in vadose zone

征求意见稿

在提交反馈意见时，请将您知道的相关专利连同支持性文件一并附上。

XXXX - XX - XX 发布

XXXX - XX - XX 实施

中国土壤学会 发布

目 次

前 言.....	II
1 范围.....	3
2 规范性引用文件.....	3
3 术语和定义.....	3
3.1 浓度衰减系数 concentration reduction factor.....	3
4 总体要求.....	3
4.1 化合物类型特异性.....	3
4.2 情景特异性.....	3
5 土壤有机污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数估算方法框架.....	3
6 数据收集.....	4
6.1 一般规定.....	4
6.2 确定数据需求.....	4
6.3 明确数据来源并获取.....	4
6.4 数据清洗与处理.....	5
7 概念模型构建.....	5
7.1 一般规定.....	5
7.2 空间离散化.....	5
7.3 时间离散化.....	7
8 土壤-地下水系统有机污染物运移模拟.....	7
8.1 一般规定.....	7
8.2 参数设置.....	7
8.3 包气带污染物运移模拟.....	9
8.4 地下水污染物扩散过程模拟.....	9
9 浓度衰减系数计算.....	9

前 言

本文件按照GB/T 1.1—2020《标准化工作导则 第1部分：标准化文件的结构和起草规则》的规定起草。

本文件由中国科学院生态环境研究中心提出。

本文件由中国土壤学会归口。

本文件起草单位：中国科学院生态环境研究中心、中科院建筑设计研究院有限公司、中国科学院地理科学与资源研究所。

本文件主要起草人：王美娥、张雪云、王一恒、马万凯、谢天、吕斯丹、陈卫平。

土壤有机污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数估算技术指南

1 范围

本文件规定了土壤有机污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数估算技术的范围、规范性引用文件、术语和定义、总体要求和估算方法框架、数据收集、概念模型构建、污染物运移模拟以及浓度衰减系数计算。

本文件适用于有机物污染的土壤-地下水风险评价和基于地下水安全的土壤污染阈值推导。

2 规范性引用文件

下列文件中的内容通过文中的规范性引用而构成本文件必不可少的条款。其中，注日期的引用文件，仅该日期对应的版本适用于本文件。凡是不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

- GB 14148 地下水质量标准
- HJ 164 地下水环境监测技术规范
- HJ 166 土壤环境监测技术规范
- HJ 25.1 建设用地土壤污染状况调查技术导则
- HJ 25.2 建设用地土壤污染风险管控与修复监测技术导则
- HJ 25.3 建设用地土壤污染风险评估技术导则
- HJ 610 环境影响技术评价导则 地下水环境
- HJ 1019 地块和土壤地下水中挥发性有机物采样技术导则

3 术语和定义

下列术语和定义适用于本文件。

3.1 浓度衰减系数 concentration reduction factor

土壤表层孔隙水与潜水层中污染物的浓度之比，无量纲。

4 总体要求

4.1 化合物类型特异性

本标准要求化合物在土壤剖面的浓度能够达到平衡状态。本标准基于溶质垂直运移模型HYDRUS-1D模拟化合物淋溶过程，因此，只有通过模型模拟预测能达到平衡的化合物才适用于本标准规定的方法。

4.2 情景特异性

假设的情景为地下水浅层水扩散过程与包气带淋溶过程相耦合的情景，在地下水埋深较深，包气带水文过程不利于化合物淋溶的情景下，只涉及下渗过程的浓度衰减，因此，浓度衰减系数的计算中不需要考虑地下水的扩散稀释。

5 土壤有机污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数估算方法框架

土壤有机污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数方法框架主要包括：（1）数据收集；（2）概念模型构建；（3）土壤-地下水系统污染物运移模拟；（4）浓度衰减系数计算。方法框架如图1所示。

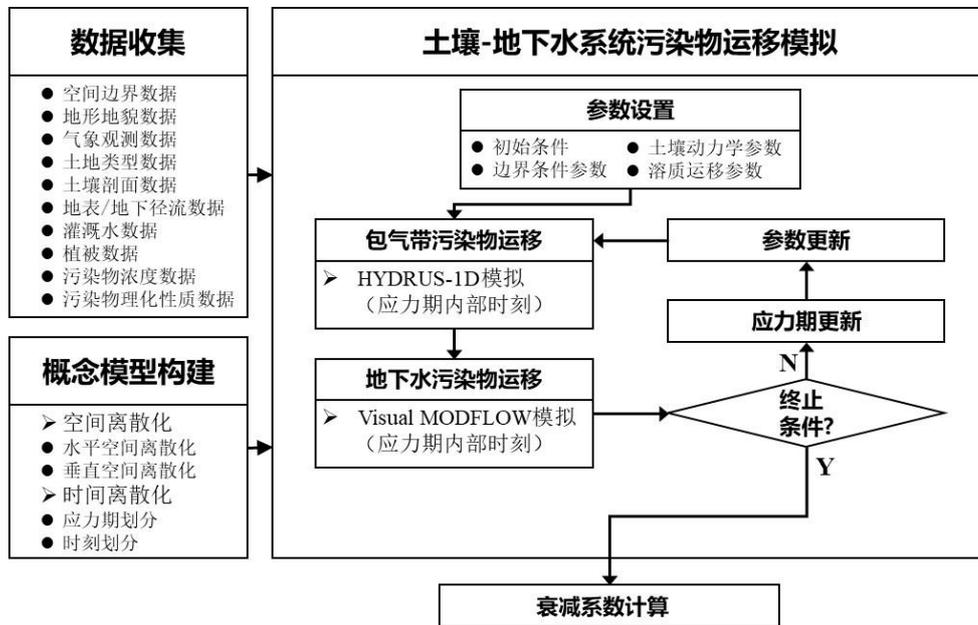


图 1 土壤有机污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数估算方法框架

6 数据收集

6.1 一般规定

数据收集主要包括以下步骤：（1）确定数据需求；（2）明确数据来源并获取；（3）数据清洗与处理。数据收集是模型构建与试验的基础。其中，勘察测定数据的获取方式参考 HJ 25.1、HJ 25.2、HJ166。本方法耦合了 HYDRUS-1D 模型与 MODFLOW 模型，两种模型对数据与参数敏感，因此获取数据的精确程度、完备程度对模型方法的精度与准度影响较大。

6.2 确定数据需求

根据 HYDRUS-1D 模型与 MODFLOW 模型所需参数，确定土壤有机污染物包气带垂直淋溶衰减系数估算方法所需数据，包括：空间边界数据、地形地貌数据、气象观测数据、土地类型数据、土壤剖面数据、地表/地下径流数据、灌溉水数据、植被数据、污染物浓度数据、污染物理化性质数据以及模型相关参数数据。

6.3 明确数据来源并获取

根据数据来源不同，将所需数据分为 6 类：（1）勘察测定数据；（2）地理空间数据集数据；（3）遥感图像及其衍生数据；（4）站点观测数据；（5）统计调查数据；（6）其他资料数据。

（1）勘察测定数据

通过实地勘察测定，获取对应采样点现实状态数据，并通过空间插值的方法推理整个区域内部数据。本指南中具体指 1) 土壤剖面数据：用于描述土壤各土层理化性质的数据，是模型模拟过程中介质的物理基底描述，通过实地采样点勘察测定以及空间插值获取；2) 污染物浓度数据：用于描述土壤中污染物原始浓度的数据，用于确定模型模拟的初始条件，通过实地采样点勘察测定以及空间插值获取。

（2）地理空间数据集数据

以结构化的形式存储的空间矢量数据，用于描述空间中点、线、面等实体的空间形态以及属性。本指南中具体指：1) 空间边界数据：用于描述模拟区域的范围、边界以及区域内各项地理实体空间分布，通过公开或非公开的地理数据集获取；2) 地形地貌数据：用于描述区域内地形起伏状态的空间数据，本指南中特指 DEM 数据，通过公开或非公开的地理数据集获取；3) 地表/地下径流数据：用于描述区域内地表径流以及地下径流的空间分布以及流量大小，通过公开或非公开的地理数据集获取。

(3) 遥感图像及其衍生数据

通过遥感卫星拍摄对应地区的遥感图像数据，以及通过遥感图像处理手段得到对应的衍生产品数据。本标准中具体指：1) 土地类型数据：用于描述各个地块土地用地类型的栅格数据，通过公开的遥感图像产品网站获取指定区域的遥感图像，并通过遥感图像分类技术识别各个地块用地类型，得到土地类型数据，或直接获取成品数据；2) 植被数据：用于描述各地图植被类型与状态的栅格数据，通过公开的遥感图像产品网站获取指定区域的遥感图像，并通过遥感图像目标识别技术得到植被类型，或根据 NDVI 数据推理植被生长状态，得到相关数据。

(4) 站点观测数据

区域内观测站点中多种传感器记录的基于时刻的连续、长时间序列数据。本标准中具体指：1) 气象观测数据：用于描述观测站点所处地理位置气象状态的数据，包括温度/气温、气压、风向、风速、相对湿度、降水量等信息，通过公开的气象产品网站获取指定的气象数据，并通过空间插值得到对应时刻区域内全空间的气象状态数据；2) 区域内地表径流观测数据，包括水位站/水质站连续观测数据，用于模型参数校准与验证。观测站点数据精度无具体要求，数据用于模型参数校准与验证。

(5) 统计调查数据

相关组织或个人通过相应调查手段，对区域内某种属性数值进行调查汇总，采用统计手段得到的描述区域单元属性强弱的数值数据。本标准中具体指灌溉水数据：用于描述区域内灌溉活动强弱的统计数据，记录区域单元或更小分区的集水单元内部的灌溉流量以及流速等信息，通过相关统计年鉴或统计记录直接获取。

(6) 其他资料数据

来源于各种文献资料的参数资料数据，用于概化描述环境因素的运动规律与理化性质，对现实环境进行简化，降低模型复杂程度。本标准中具体指：1) 污染物理化性质数据：用于描述污染物的元素特征，物理性质以及化学性质的参数，由相关文献资料中获取；2) 模型相关参数数据：用于对模型模拟过程进行量化界定的数据，包括边界条件参数、溶质运移参数、土壤动力学参数等，由相关文献资料中获取。

6.4 数据清洗与处理

根据数据现状与模型需求，进行数据去重、缺失值处理、异常值处理、数据标准化、数据转换以及数据验证操作，对现有数据进行清洗与处理，得到数据完备、结构规整、数值正确的高质量数据。

7 概念模型构建

7.1 一般规定

概念模型构建关键在于离散化处理，主要包括：(1) 空间离散化；(2) 时间离散化。本标准中耦合 HYDRUS-1D 模型与 MODFLOW 模型，需要对空间域与时间域进行离散化处理，考虑到 HYDRUS-1D 模型与 MODFLOW 模型之间的交互影响，离散化处理时应保证对两种模型的兼容性。

7.2 空间离散化

空间离散化用于确定模型方法依赖的空间单元，包括水平空间离散化与垂直空间离散化两部分。MODFLOW 模型研究溶质在水平与垂直空间随液体对流与弥散过程，而 HYDRUS-1D 模型仅研究垂直方向溶质液体液体渗透运移的过程，不考虑水平空间内分布特征，因此水平空间离散化仅需考虑 MODFLOW 模型特性，而垂直空间离散化需要同时考虑两种模型的特性。

7.2.1 水平空间离散化

水平空间离散化用于 MODFLOW 模型模拟。在以东西向为 X 坐标轴且东方向为正方向，南北向为 Y 坐标轴且北方向为正方向的笛卡尔坐标系中，对研究区进行格网化剖分。根据研究区大小，确定格网单元大小，既不能过大，避免地理空间中细节信息丢失以及放大边缘效应，又不能过小增加信息与模拟的冗余。设定格网单元的在 X 轴与 Y 轴方向的长度分别为 dx 与 dy ，使格网单元无空隙无压盖的铺满整个研究区域。每个格网单元即为采用 MODFLOW 模型模拟溶质运移时水平方向的模拟单元。水平空间离散化示意图如图 2 所示。

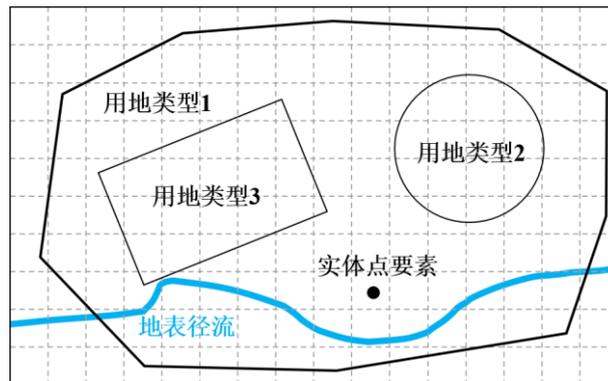


图 2 水平空间离散化示意图

7.2.2 垂直空间离散化

垂直空间离散化用于 MODFLOW 模型与 HYDRUS-1D 模拟。垂直空间离散化包含两个阶段，其示意图如图 3 所示：

(1) 第一阶段：兼容 MODFLOW 模型的垂直空间离散化

在该阶段，针对水平空间离散化中获得的格网单元，对每个单元分别建立以垂直向上为正方向的 Z 轴，地表处为坐标轴原点。根据介质不同将格网单元内部对应的垂直空间分成包气带与含水层，含水层作为 MODFLOW 模型模拟时的剖面层。

(2) 第二阶段：兼容 HYDRUS-1D 模型的垂直空间离散化

在该阶段，将第一阶段中每个栅格单元在垂直空间上划分出来的包气带进行细化，根据 HJ 25.26.2.1.1 (4) 的规定，0-0.5 m 表层土壤、0.5 m~6 m 间隔不超过 2 m；最大深度至少至潜水层。由此将包气带划分为 k 个不同的土层，作为 HYDRUS-1D 模型模拟时的垂直剖面划分。不同性质土层至少划为单独一层，剖面层划分时应尽可能保证单个土层内土质均匀。

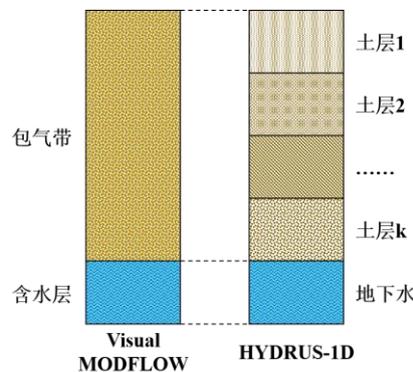


图 3 垂直空间离散化示意图

7.3 时间离散化

时间离散化用于确定模型方法所在时间域内的应力周期与迭代步长，主要包括应力期划分与时间步长划分两个方面。

7.3.1 应力期划分

应力期为 MODFLOW 模型中所需的时长概念，模型假设同一应力期内，边界条件保持不变，两个应力期间，模型边界条件发生瞬时改变。应力期的划分取决于模型边界条件因素变化趋势，选取边界条件相对稳定的时长 T 进行应力期划分。

7.3.2 时间步长划分

时间步长是模型在时间尺度上的分辨率。时间步长设置需要考虑模型的稳定性，HYDRUS-1D 模拟时的数值弥散，边界条件随时间的变化情况以及与时间相关模拟目标。时间步长越小模拟精度越高，但与之相对所需计算消耗更大。耦合的 MODFLOW 模型与 HYDRUS-1D 模型采用相同的时长 dt 作为模型迭代的时间步长， dt 满足：

$$dt \leq \min\{dt_{\text{MODFLOW}}, dt_{\text{HYDRUS-1D}}\}$$

其中， dt_{MODFLOW} 与 $dt_{\text{HYDRUS-1D}}$ 分别为 MODFLOW 模型与 HYDRUS-1D 模型合适时间步长，且满足：

$$\left| \frac{v_x dt_{\text{MODFLOW}}}{dx} \right| \leq 1 \text{ and } \left| \frac{v_y dt_{\text{MODFLOW}}}{dy} \right| \leq 1 \text{ and } \left| \frac{v_z dt_{\text{HYDRUS-1D}}}{dz_{\min}} \right| \leq 1$$

其中， v_x 、 v_y 、 v_z 分别为溶质在 X 轴、Y 轴、Z 轴的移动速率， dx 与 dy 分别为水平空间离散化中格网单元在 X 轴与 Y 轴方向的长度， dz_{\min} 为垂直空间离散化时第二阶段对包气带进行土层剖分时最薄土层的厚度。

8 土壤-地下水系统有机污染物运移模拟

8.1 一般规定

包气带污染物运移模拟依赖 HYDRUS-1D 模型，该模型主要用于变饱和孔隙介质中水、热、溶质的一维运移数值模拟，主要包括两个过程，利用 Richards 方程求解变饱和水流运移，以及利用对流-弥散方程通过有限元计算求解热、溶质的运移。使用 PC-Progress 提供的 HYDRUS-1D 软件对包气带污染物运移进行模拟。

地下水污染物运移模拟依赖 MODFLOW 模型，该模型是一个地下水三维有限差分数值模拟的工具，常用来模拟预测地下水中水流、溶质的时空变化。其中主要用到模拟地下水流的 MODFLOW 模块与模拟地下水中溶质运移的 MT3DMS 模块。使用 Waterloo Hydrogeologic 提供的 Visual MODFLOW Flex 软件对地下水污染物运移进行模拟。

8.2 参数设置

模型参数设置包括初始条件参数、边界条件参数、土壤水动力学参数、溶质运移参数等，参数性质及数据来源分别如表 1~表 4 所示。

表 1 初始条件的参数及数据来源

参数	来源
水文地质单元分布	钻孔数据、地质图数据、地球物理方法获取
污染源	化学物品清单、库存、渗滤试验、航拍图
污染物浓度背景值	野外浓度测量
初始水位	野外水位测量
土壤孔隙度	土样分析
土壤体积容度	土样分析
土壤密度和粘度	文献值
土壤溶液导电率	实验室仪器测量
非饱和带的土壤特征	土壤渗透性测量

表 2 边界条件参数及数据来源

数据与参数	来源
降水量	站点观测
蒸腾量	站点观测
蒸发量	站点观测
灌溉量	统计调查
灌溉水质	统计调查
抽水量	统计调查
水流流速	野外勘察测定
植物吸收量	野外勘察测定
弹性给水度	微水试验、抽水试验
重力给水度	微水试验、基于孔隙度计算
水力梯度	野外水位测量

表 3 土壤水动力学参数设置

数据与参数	来源
土壤含水量	实验室烘土称重法测定
土壤饱和含水量	ROSETTA 模型估算
土壤残余含水量	
土壤孔径分布指数	
土壤进气倒数	
土壤饱和导水率	

表 4 溶质运移参数设置

数据与参数		来源
分子扩散系数		文献值
弥散系数	纵向弥散系数	示踪试验、其它通过野外数据验证的模型、文献值
	横向弥散系数	
	垂向弥散系数	
分配系数分布		批量试验、土柱实验、有机物的经验方程、文献值
渗透系数		微水试验、抽水试验、文献值

8.3 包气带污染物运移模拟

基于 7.2 空间离散化的结果,将 7.2.1 水平空间离散化中每个栅格作为独立单元,批量使用 HYDRUS-1D 模型进行模拟。每处单元模拟输入的土壤剖面结构通过 7.2.2 中垂直离散化方法获取。模拟时间步长由 7.3.2 中时间步长划分方法确定。模拟时段区间为当前应力期时段区间。

8.4 地下水污染物扩散过程模拟

Visual MODFLOW 中把整个模拟时段分成若干个应力期,每个应力期又分为若干个时间段,一般将应力期设为 15 天,每个应力期中以天为时间段。HYDRUS-1D 的输出用来定义 Visual MODFLOW 的上边界条件,根据地下水流向,在高水位区设定为水头边界,根据水力梯度 0.025% 计算,低水位区设为排水边界,下边界设置为弱渗透层。

9 浓度衰减系数计算

基于 8.3 包气带污染物运移模拟,获得特定深度(包括表层土壤)随时间变化的溶质浓度,当特定深度污染物浓度达到动态平衡时,该深度的最大浓度视为土壤平衡浓度;基于 8.4 地下水污染物运移模拟,获得潜水层中的污染物浓度。包气带垂直淋溶浓度衰减系数衰减因子 AF 计算如公式(3)如下:

$$AF = \frac{C_e}{C_d} \quad (3)$$

式中, C_e 为土壤表层孔隙水中污染物的浓度 (mg/L) (溶质运移模拟模型获得); C_d 为潜水层中污染物的浓度 (mg/L)。