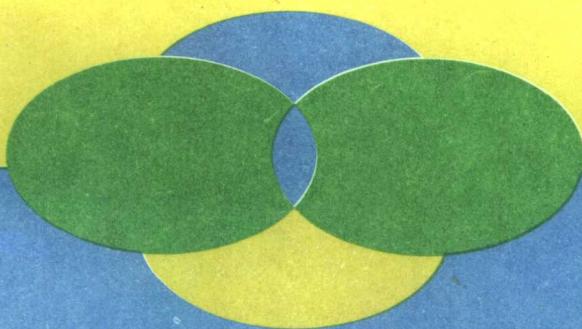


国家自然科学基金项目

地表生态系統 污染物质迁移转化 及模拟软件

吴启堂 陈同斌 编著



中国农业科技出版社

国家自然科学基金项目

地表生态系统污染物质
迁移转化及模拟软件

吴启堂 陈同斌 编著

中国农业出版社

(京)新登字061号

图书在版编目(CIP)数据

地表生态系统污染物质迁移转化及模拟软件/吴启堂,
陈同斌编著. - 北京: 中国农业科技出版社, 1996.10

ISBN 7-80119-228-1

I . 地… II . ①吴… ②陈… III . 地表·生态系统·污
染物·迁移·研究 IV . X132

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (96) 第 08677 号

责任编辑	王涌清
技术设计	
出版发行	中国农业科技出版社 (北京海淀区白石桥路30号)
经 销	新华书店北京发行所发行
印 刷	北京市怀柔新华印刷厂印装
开 本	850×1168 毫米 1/32 印张: 6.75
印 数	1~1000 册 字数: 181 千字
版 次	1996年10月第一版 1996年10月第一次印刷
定 价	12.00 元

序 言

随着我国国民经济的快速发展，环境污染和资源短缺成为摆在我们面前的严峻挑战。目前，我国大气、水体、土壤和生物都受到不同程度的污染，对人体健康和社会经济生活带来不可忽视的影响。因此，保护生态环境、合理利用资源引起了社会和科技工作者的极大关注。土壤－水－植物系统是一个基本的陆地生态单元，是人们赖以生存的基础，也是污染物质的重要受纳场所。几十年来，科学家们对该系统进行了大量的研究，积累了丰富的资料，但较系统地介绍该系统中污染物质迁移转化规律的书籍不多。本书将对该系统中污染物质的迁移转化特征作一简要回顾，而着重介绍迁移转化模型和软件，包括微观的和宏观的模型，试图从微观机理出发，实现为宏观目标服务的预测，使读者不仅对其基本理论有一定的了解，而且可运用所介绍的软件对实际情况进行模拟，为环境影响评价、环境保护措施的选择以及农业生产服务。

本书可供环境科学、土壤学、生态学、植物营养等领域的教师、研究人员、工程技术人员和学生参考。

本书在编写过程中得到华南农业大学国土资源和环境科学系李永涛、蒋成爱等人的大力支持和帮助，在此表示感谢。

由于作者水平所限，疏漏和错误之处难免，请同仁及广大读者批评指正。

编著者
1996.9

目 录

序言

第一章 地表生态系统及其污染物来源	(1)
1 地表环境	(1)
2 土壤生态环境	(2)
2.1 土壤形成因素	(2)
2.2 土壤污染物质的来源	(3)
2.3 土壤污染的危害	(15)
3 土壤-水-植物系统	(20)
3.1 土壤-水-植物系统的基本结构与功能	(20)
3.2 土壤-水-植物系统与环境保护	(21)
3.3 土壤-水-植物系统的研究现状	(21)
参考文献	(22)

第二章 土壤水溶液中的化学平衡及 GEOCHEM 软件	(25)
1 引言	(25)
1.1 原理	(25)
1.2 GEOCHEM 软件的主要功能	(26)
1.3 GEOCHEM 软件的容量及限制	(26)
2 数据输入	(30)
2.1 研究体系的基本情况	(30)
2.2 研究元素的具体情况	(31)
2.3 操作注意事项	(32)
3 简单水溶液举例	(33)
4 氧化-还原反应	(38)

5	吸附和交换作用	(38)
5.1	吸附作用	(38)
5.2	交换作用	(44)
6	应用情况	(47)
	参考文献	(47)

第三章 土壤中水分和污染物质迁移的模拟和 CHEMFLO

	软件	(49)
1	引言	(49)
2	数学模型	(50)
2.1	水分运动方程	(50)
2.2	化学物质迁移转化方程	(54)
2.3	模型的数值解法	(56)
3	CHEMFLO 软件运行的软、硬件要求	(58)
3.1	硬件要求	(58)
3.2	软件要求	(58)
4	使用方法及举例	(59)
4.1	水分运动模拟	(60)
4.2	水和化学物质的运动	(72)
4.3	输入、修改或打印土壤水分特征参数	(80)
5	讨论	(83)
	参考文献	(84)

第四章 土壤中根系生长的模拟

 (86) |

1	引言	(86)
2	影响根系生长的因素	(86)
2.1	土壤化学因素	(87)
2.2	土壤物理因素	(91)
2.3	遗传因素和耕作措施	(98)

3	CERES 模型中根系生长的模拟	(99)
3.1	土壤因素对根系生长影响的计算方法	(99)
3.2	根系分布的模拟	(104)
3.3	模型的输入参数	(109)
3.4	模型的输出及应用举例	(111)
4	根系生长动态的三维模型	(120)
4.1	模型的基本原理	(120)
4.2	模型的应用举例	(124)
	参考文献	(129)

	第五章 土壤－水－植物系统污染物质的迁移及模型	(132)
1	影响污染物质迁移转化的因素	(132)
1.1	土壤因素	(132)
1.2	植物因素	(137)
2	预测土壤－植物系统中物质迁移的经验模型	(139)
3	Barber－Cushman 模型	(141)
3.1	模型的基本方程	(141)
3.2	模型所用参数及测定	(144)
3.3	模型的验证	(145)
3.4	模型软件的使用方法及举例	(146)
3.5	模型参数的灵敏度分析	(154)
4	简单的机理模型	(156)
4.1	解吸（溶解）作用	(157)
4.2	质流运输和扩散作用	(165)
4.3	植物根系吸收	(167)
4.4	模型的验证	(171)
5	讨论	(175)
6	展望	(178)
6.1	根系吸收数学模型的作用和限制	(178)
6.2	今后应加强的工作	(179)

参考文献	(180)
第六章 土壤污染治理及其决策咨询系统	(184)
1 引言	(184)
2 土壤污染物的种类与特点	(185)
2.1 无机污染物	(185)
2.2 有机污染物	(186)
3 污染土壤的治理和改良利用	(187)
3.1 工程措施	(188)
3.2 生物措施	(190)
3.3 改良剂措施	(190)
3.4 农业措施	(191)
4 土壤污染治理方法的选择	(193)
4.1 影响选择土壤污染治理方法的因素	(193)
4.2 土壤污染治理的决策过程	(198)
5 土壤污染治理决策咨询系统	(199)
5.1 系统的目标和指导原则	(199)
5.2 系统的设计	(200)
5.3 系统所需软、硬件环境	(202)
5.4 系统的运行过程和功能介绍	(203)
5.5 系统的特点	(206)
参考文献	(207)

第一章 地表生态系统及其 污染物来源

1 地表环境

科学家们把地球表面分为大气圈、水圈、生物圈和岩石圈，如图 1-1 所示。

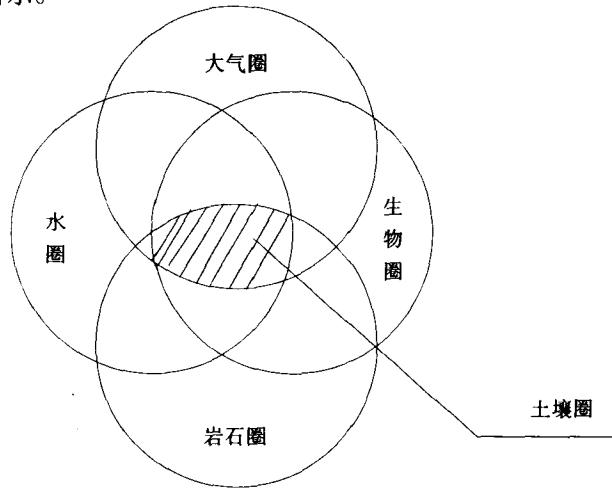


图 1-1 地表环境的圈层及其相互联系

这些圈层互相联系，密不可分，其交汇点为土壤圈。土壤圈的组成成分决定了它既是岩石圈、生物圈的一部分，也是大气圈和水圈的一部分。

人类就生活在这一个地表环境中，简单地说，住在土壤（岩

石) 圈之上，呼吸着大气圈中的空气，吃的是生物圈生产的食物，喝的是水圈中的水。因此，大气、水、土壤和生物，是支持地球生命的自然系统(美国国际环境与发展研究所，1990)。

今天，合理利用地球资源，维护地表环境的生态平衡，防止环境污染，是人类面临的重大挑战。正所谓“我们只有一个地球”，“明天和今天一样重要”，要把对生命支持系统的各种影响减小到最小限度(美国国际环境与发展研究所，1990)。这就要求我们对地表环境各要素及其联系加以研究，以便拟定相应的对策和措施。近年来，对地表大环境的研究已成为环境科学的研究热点，如对全球气候变化、温室效应、臭氧层变薄等的研究；同时对地表微环境，如土壤—水—植物这样一个基本陆地生态系统，也做了大量工作，因为这一地表生态系统是物质流动的交换站，直接影响着食物链的数量和质量。

2 土壤生态环境

2.1 土壤形成因素

影响土壤形成和土壤性质的自然因素有：母质、生物、气候；地形和时间。这些因素的影响在有关土壤学著作中已有详细的阐述。而人类活动对土壤的发生、发展也有重大影响。我们可用

$$S=f(C, P, V, R, M, T)$$

来表示土壤形成因素与土壤的关系，即气候(C)作用于母质(P)，同时生物(V)生长繁殖留下有机残体，这是土壤形成的主要因素，再因地形(R)及人类(M)的影响而变化，这些影响随着不同的作用时间(T)而形成不同特性的土壤(S)。

在现代社会，人类对土壤的影响不仅是传统的耕作、施肥和种植，而且各种社会活动把许多污染物质带入土壤，使土壤的性质和

功能发生重大的变化。下面将对后者作进一步的讨论。

2.2 土壤污染物质的来源

土壤污染物质的来源有自然的和人为的两种。自然污染源主要是土壤母质（母岩）；人为污染源包括：化肥、农药、土壤改良剂（如石灰）、城市污泥、城市垃圾、动植物废料、灌溉水（废水）、粉煤灰和降尘（工业废气、汽车尾气等）。根据 Kloke 等（1984）的报道，在发达国家，土壤微量污染物质的主要来源是：空气降尘 > 河流冲积物（母质）> 城市污泥>城市垃圾、堆肥>农用化学品 > 工业废物。下面将对土壤污染物的来源作一个简要介绍。

2.2.1 母质

未受人类干扰的土壤，其污染物质含量在很大程度上取决于母质本身的含量及其风化成土过程。成土时间越长，受母质影响越小。表 1-1 列出了不同成土母岩的微量有害物质含量（Adriano, 1986）。值得注意的是，有些母质本身所含的污染物浓度也可能很高，并对生态环境造成危害。如美国加利福尼亚地区，页岩含 Cd 量达 33mg/kg，造成土壤和植物的自然污染（Lund et al, 1981）。

2.2.2 化肥

各种化肥都含有一些微量污染物，表 1-2 给出了美国不同化肥的污染元素含量。肥料中的污染物主要来源于原料中的磷矿和硫酸（硫铁矿）。在美国，西部磷矿中的污染物含量高于东部磷矿（Adriano, 1986）。如表 1-3 所示，我国的磷矿含 Cd 浓度较低（鲁如坤, 1992），但硫酸中含砷量较高。目前，我国不少地区还利用各种工业和生活有机废弃物制有机无机复混肥，也带来不少污染物质，应引起注意。

除了化肥中的微量有害物质外，硫酸铵等生理酸性肥料可使土壤酸化，过量施用 N、P 肥，可加重水体富营养化，增加植物食品的硝酸盐含量。

表 1-1 不同成土母质的微量元素含量 (mg/kg)*

元素	基性岩	花岗岩	页岩和粘土	黑页岩	深海粘土	石灰岩	砂岩
As	0.2~10	0.2~13.8	—	—	—	0.1~8.1	0.6~9.7
	2.0	2.0	10	—	13	1.7	2
Ba	20~400	300~1800	460~1700	70~1000	—	10	—
	300	700	700	300	2300	—	20
Be	1.0	2~3	3	—	2.6	—	—
Cd	0.006~0.6	0.003~0.18	0~11	<0.3~8.4	0.1~1	—	—
	0.2	0.15	1.4	1.0	0.5	0.05	0.05
Cr	40~600	2~90	30~590	26~1000	—	—	—
	220	20	120	100	90	10	35
Co	24~90	1~15	5~25	7~100	—	—	—
	50	5	20	10	74	0.1	0.3
Cu	30~160	4~30	18~120	20~200	—	—	—
	90	15	50	70	250	4	2
F	20~1060	20~2700	10~7600	—	—	0~1200	10~880
	360	870	800	—	1300	220	180
Fe	86500	14000~3000	47200	20000	65000	3800	9800
Pb	2~18	6~30	16~50	7~150	—	—	<1~31
	6	18	20	30	80	90	12
Hg	0.002~0.5	0.005~0.4	0.005~0.51	0.03~2.8	0.02~2.0	0.01~0.22	0.001~0.3
	0.05	0.06	0.09	0.5	0.4	0.04	0.05
Mo	0.9~7	1~6	—	1~300	—	—	—
	1.5	1.4	2.5	10	27	0.4	0.2
Ni	45~410	2~20	20~250	10~500	—	—	—
	140	8	68	50	225	20	2
Se	0.05	0.05	0.6	—	0.17	0.08	0.05
V	50~360	9~90	30~200	50~1000	—	—	—
	250	60	130	150	120	20	20
Zn	48~240	5~140	18~180	34~1500	—	—	2~41
	110	40	90	1002	165	20	16

* 引自 Cannon (1978)。每个元素第一行为变化范围，第二行为平均值。

表 1-2 肥料中的微量元素含量 (mg/kg)*

肥料	Zn	Cu	Mn	B	Mo	Co	Cr	Ni	Pb	V	Cd
磷酸铵试剂级	1.0	1.6	0.6	-	-	-	0.2	1.0	0.5	0.3	0.9
Idaho 磷矿	71.5	2.7	195	-	-	-	485	64	4.4	1600	50
North Car. 磷矿	285	1.0	93	-	-	-	195	38	4.7	90	30
磷矿粉	187	32	975	72	555	109	184	-	962	-	-
过磷酸钙	165	15	890	132	335	77	87	-	488	-	-
重过磷酸钙	418	49	75	212	270	47	392	-	238	-	-
液体肥料 Idaho 磷矿	673	1.1	125	-	-	-	344	8.0	9.0	1150	44
North Car. 磷矿	500	1.4	25	-	-	-	175	35	5.2	52	17
尿素	4.0	0.6	0.5	1.0	5.3	-	6.3	-	-	-	-
硝酸铵钙	7.6	2.8	25	9.0	56	6.6	8.5	-	116	-	-
硫酸铵	11	0.8	3.5	-	6.0	24	4.0	-	-	-	-
氯化钾	10	3.1	3.5	16	26	22	13	-	117	-	-
N-P-K 复合肥	88	18	13.2	61	200	51	116	-	444	-	-
过磷酸钙 (磷灰石制造)	-	-	-	-	10	-	20	5	-	5	-

* 引自 Adriano, (1986)。

表 1-3 我国和国外部分磷矿和磷肥的含镉量 (mg/kg)

国名	矿石	磷矿(粉)含镉量	国名	磷肥含镉量
中国	全部矿	15.3 (0.1 - 571)	中国	0.1 - 2.9
	主要矿	0.98 (0.1 - 4.4)		(过磷酸钙: 0.1 - 2.9)
前苏联	Kola	0.3	美国	(钙镁磷肥: 0.1 - 0.2)
	Florida	7.0 (3.0 - 12.0)		7.4 - 15.6
美国	N.C.	36.0	加拿大	2.1 - 9.3
	Togo	53.0 (38.0 - 60.0)		18 - 91
多哥 摩洛哥	Khouribga	12.0 (1.0 - 17.0)	澳大利亚	2 - 3
	Joussoufia	4.0		

2.2.3 农药

农药，包括杀虫剂、杀菌剂、除草剂、灭鼠剂等，在现代农业生产中广泛应用。这些农药本身是有害物质，对动植物有重要影响，若使用过量或残留时间较长便会造成污染，如过去使用的六六六，DDT 等的残留污染。不同农药的残留时间列于表 1-4。有些农药还含有其它污染元素，特别是重金属，表 1-5 列出了加拿大 1975 年以前使用的含重金属农药的品种，有些还在我国继续使用。砷化铅等农药的使用，每次可带给每公顷土地数千克的污染物。

表 1-4 一些农药在土壤中的残留时间（消失 95% 所需时间）

农药种类	残留时间 (天)	农药种类	残留时间 (天)	农药种类	残留时间 (天)
有机氯		有机磷		除草剂	
DDT	10	乐果	4	毒莠剂	700
狄氏剂	8	马拉松	7	西玛津	454
林丹	6.5	对硫磷	7	灭草隆	389
氯丹	4	甲拌磷	15	利谷隆	156
碳氯特灵	4	乙拌磷	30	2, 4-D	39
七氯	3.5	二噁农	50 - 180	扑草灭	35
艾氏剂	3			燕麦灵	17

表 1-5 加拿大渥太华地区 1892 - 1975 年间推荐使用的含重金属农药

化合物	金属组成	推荐使用期间	作物
杀虫剂			
醋酸砷铜	2.3 % As, 39 % Cu	1895 - 1920 1895 - 1927	苹果和樱桃 蔬菜和小水果
砷酸钙	4.2 % - 9.1 % As	1910 - 1953	水果和蔬菜
砷酸铅	4.2 % - 9.1 % As	1910 - 1975	苹果
	11 % - 26 % As	1910 - 1971 1910 - 1956	草莓 桃
氯化汞	6 % Hg	1932 - 1954	十字花科作物
硫酸锌	20 % - 30 % Zn	1939 - 1955	桃

续表 1-5

化合物	金属组成	推荐使用期间	作物
杀菌剂			
石硫合剂	4% - 6% Cu	1892 - 1975	水果和蔬菜
固体铜盐	2% - 56% Cu	1940 - 1975	水果和蔬菜
		1948 - 1975	水果
代森锰	1% - 17% Mn	1947 - 1975	水果和蔬菜
代森锰锌	16% Mn, 2% Zn	1966 - 1975	水果和蔬菜
甲基苯汞盐	0.6% - 6% Hg	1932 - 1972	种子处理
赛力散	6% Hg	1954 - 1973	苹果
代森锌	1 - 18% Zn	1947 - 1975	蔬菜
		1957 - 1975	水果
灭鼠剂			
亚砷酸钙	30% As	1930 - 1972	蔬菜
亚砷酸钠	26% As	1920 - 1972	蔬菜

* 引自 Frank et al. (1976)。

2.2.4 石灰

石灰广泛应用于酸性土壤，以提高土壤 pH 和养分的有效性。石灰中微量有害元素的含量见表 1-6，含量高低主要决定于石灰石的来源。若每公顷使用 4.5 吨，可带给土壤 0.14kg 锌和 1kg 氟等污染物。

表 1-6 美国石灰的化学分析结果

元素	浓度 (样品数=194)	
	平均 (%)	变幅 (%)
Ca	30.21	17.98 - 39.76
Mg	4.92	0.04 - 9.86
Si	2.36	0.03 - 15.53
Al	0.45	0.01 - 2.15
Fe	0.43	0.01 - 3.11
K	0.23	<0.0001 - 1.80
S	0.11	<0.01 - 1.35

续表 1-6

元素	浓度 (样品数 = 194)	
Na	0.03 ppm	<0.001 - 0.15 ppm
Mg	330	20 - 3000
F	230	<10 - 1410
P	210	10 - 1410
Zn	31	<1 - 425
V	11	<-106
B	4	<1 - 21
Cu	2.7	<0.1 - 92
Mo	1.1	<0.1 - 92
Co	<1	<1 - 6

* 根据 Chichilo and Whittaker (1961) 的资料。

2.2.5 城市污泥

城市污泥是城市污水处理厂产生的废料，每处理 1 万吨水可产生大约 4 吨城市污泥（含水 80% - 85%）。1990 年美国产生约 1.4×10^7 吨的城市污泥 (Adriano, 1986)。我国目前在上海、广州、深圳、北京、无锡等地建有 120 个污水处理厂，日处理废水几百万吨。城市污泥的土地处理是古老而常用的方法，但可带入重金属等污染物。表 1-7、表 1-8 分别列出了几个国家城市污泥的微量元素含量水平和德国 Braunschweig 地区一个农场长期使用城市污泥后有害元素的变化情况 (Adriano, 1986)。城市污泥中污染元素的含量有随城市人口增加而呈增加的趋势，如表 1-9 所示的美国 Iowa 地区不同人口城镇组别的城市污泥其污染物质含量情况 (Tabatabai and Frankenberger, 1979)。

表 1-7 城市污泥的微量元素含量 (mg/kg)

元素	美国		英国		瑞典		加拿大	新西兰
	平均	变幅	平均	变幅	平均	变幅	平均	平均
Ag	-	-	32	5 - 150	-	-	-	-
As	14.3	3 - 30	-	-	-	-	-	-
B	37.0	22 - 90	70	15 - 1000	-	-	1950	480
Ba	621	272 - 1066	1700	150 - 4000	-	-	-	580
Be	< 8.5	-	5	1 - 30	-	-	-	-
Bi	16.8	< 1 - 56	34	< 12 - 100	-	-	-	-
Cd	104	7 - 444	< 200	< 60 - 1500	13	2 - 171	38	4.5
Co	9.6	4 - 18	24	2 - 260	15	2 - 113	19	21
Cr	1441	169 - 14000	980	40 - 8800	872	20 - 40615	1960	850
Cu	1346	458 - 2890	970	200 - 8000	791	52 - 3300	1600	720
F	167	370 - 739	-	-	-	-	-	-
Hg	8.6	3 - 18	-	-	6.0	< 0.1 - 55	-	-
Mn	194	32 - 527	500	150 - 2500	517	73 - 3861	2660	610
Mo	14.3	1 - 40	7	2 - 30	-	-	13	8
Ni	235	36 - 562	510	20 - 5300	121	16 - 2120	380	350
Pb	1832	136 - 7627	820	120 - 3000	281	52 - 2914	1700	610
Sb	10.6	2 - 44	-	-	-	-	-	-
Se	3.1	1 - 5	-	-	-	-	-	-
Sn	216	111 - 492	160	40 - 700	-	-	-	80
Ti	2331	1080 - 4580	2000	< 1000 - 4500	-	-	-	4700
V	40.6	15 - 92	75	20 - 400	-	-	15	80
W	20.2	1 - 100	-	-	-	-	-	-
Zn	2132	560 - 6890	4100	700 - 49000	2055	705 - 14700	6140	700
元素	北京高碑店	上海川沙	广州大坦沙	香港	日本五城市	正常污泥		
Cd	1.9 - 54.0	25 - 48	1.5 - 2.5	0.8 - 5	1.6 - 22.7	5 - 15		
Cr	250 - 447	-	500 - 1500	80 - 1500	95 - 924	50 - 200		
Pb	136 - 260	135 - 339	100 - 250	40 - 300	-	100 - 300		
Cu	350 - 508	220 - 792	1000 - 2200	200 - 4000	235 - 1086	500 - 1500		
Zn	605 - 1225	2985 - 8480	500 - 2000	830 - 3000	1520 - 7948	1000 - 3000		
Hg	17.0 - 60.6	6 - 19.8	-	-	-	4 - 8		