

第1章

铬污染与迁移模拟研究现状分析

1.1 铬污染与人类健康

1.1.1 铬污染来源及危害

铬广泛分布于地壳中,自然界中已发现铬矿种类近三十种,估计世界铬的储藏量为26.6亿t。铬是重要的战略性资源,应用极其广泛,涉及国民经济约15%的商品品种。但是,铬的污染普遍性在重金属污染物种类中居第2位,仅次于铅。通常,每生产1t金属铬和1t铬盐分别产生10余吨和2.5~3t铬渣,每生产1t重铬酸钠,排出约 $1.5 \times 10^4 \text{ m}^3$ 的废气。全世界每年生产的铬(约750万t)约90%用于钢铁生产。铬矿采冶,含铬化合物在电镀、合金、颜料、印染、鞣革、胶印以及农业上的应用是造成铬污染的直接原因,其中以铬盐厂、电镀厂以及含铬颜料厂对环境的污染尤为突出。

铬盐系列产品是化工-轻工-高级合金材料的重要基础原料,在国民经济中具有重要的战略地位。我国是铬盐生产大国,年产量已超过30万t。据统计,我国每年排放铬渣约60万t,历年累积堆存铬渣约548万t。据中国无机盐协会调查统计,全国共有24个省(直辖市)63个地点有铬盐生产厂,其中目前仍在生产的有18家;已经关闭或破产但仍有遗留铬渣的有27家;已经破产或关闭,铬渣已经处理完毕的有18家。以上63个厂点的含铬土壤亟待修复。我国铬渣堆场分布见图1-1。我国铬渣污染场地的表层土壤普遍存在渣土及建筑垃圾共存问题,这类土壤在每个场地有1万~2万t,全国累计80万~120万t。此外,受铬严重污染的亚表层土壤和底层土壤达1250万~1500万t,这给社会留下了巨大的环境“毒瘤”。因此,渣场铬污染土壤修复工作的实现,不仅是解决因已关停铬盐企业而导致的社会遗留问题的迫切需求,而且关系到铬盐行业的生存和发展。



图 1-1 我国已经查明的铬渣污染场地分布

铬渣是土壤和地下水铬污染的主要来源之一。铬渣中 Cr(VI) 的含量可达 0.19% 以上, 总铬含量达 2.57% 左右。全国范围内 20% 以上被铬严重污染的土壤或地下水都是由于含铬废物的长期堆放和采取的防护措施不力造成的。另外, 大量的含铬废气和废水也是造成环境污染的重要原因。至今为止, 国内外还未找到真正经济、有效、实用的铬渣处理技术。因此, 铬渣的治理被认为是铬盐行业的老大难问题, 同时也是世界性的环保难题。

1.1.2 铬与人类健康

铬是人体必需的微量元素之一, 是人体内分泌腺的组成成分。铬能以 +2 价到 +6 价的形式存在于环境中, 主要以 Cr(III) 和 Cr(VI) 的形式存在。不同价态的铬化合物的毒性强弱是不同的。金属铬很不活泼, 无毒性。一般认为二价铬化合物也是无毒性的。Cr(III) 是铬最稳定的氧化态, 大鼠经口给 Cr(III) 的致癌性试验没有发现肿瘤发病率增加。Cr(III) 不易被胃肠道吸收, 在皮肤表层能够与蛋白质结合为稳定的毒性不大的络合物。同时, Cr(III) 能够协助胰岛素发挥生物作用, 为糖和胆固醇代谢所必需的元素, 其缺乏将导致糖、脂肪或蛋白代谢系统的

紊乱。 Cr(VI) 的毒性比 Cr(III) 大100倍, Cr(VI) 经吸入途径染毒的大鼠试验显示致癌性。国际癌症研究机构(International Agency for Research on Cancer, IARC)将 Cr(VI) 列入第1组(人类致癌物), Cr(III) 列入第3组(现有的证据不能对人类致癌性进行分类)。 Cr(VI) 化合物在大量的体内和体外遗传毒性试验中显示了活性,然而 Cr(III) 化合物却没有。

铬化合物可以通过皮肤、黏膜、消化道和呼吸道等途径侵入人体,并在人体内内分泌腺、心脏、胰脏和肺部中积聚,引起人体慢性中毒。 Cr(VI) 有腐蚀性和毒性,能够在人体四肢形成皮肤溃疡(俗称铬疮),可刺激或腐蚀消化道,引起骨功能和肾功能衰竭、血功能障碍,甚至会令人很快出现休克和昏迷的症状。人口服 Cr(VI) 化合物的致死剂量为1.5~1.6 g。 Cr(VI) 可被碳酸盐、硫酸盐或磷酸盐载体转运入细胞,破坏生物细胞的结构,对生物体产生致突变和致癌作用。另外,临床资料证明,长期 Cr(VI) 暴露与肺癌发生率具有明显相关性。

1.2 重金属迁移模拟

污染物在地下环境中主要通过地面以下的水分流动进行迁移。地下环境受到污染的问题,其实质是污染物在水流作用下在含水介质中运移的结果(对流、弥散和地球化学反应等),为研究此问题而兴起的一门学科就是溶质运移理论。早在1805年Fick就提出了分子扩散定律。1852—1855年,法国水力学者达西(Darcy)通过砂层渗透实验提出了渗透系数的概念,并总结出了水在砂层中的渗透规律,称之为达西定律(Darcy's Law)。随后,另一位法国水力学者裘布依(Dupuit)于1857年把渗透定律进一步应用到天然含水层中,得出了著名的裘布依微分方程。1905年,Slichter报道了土壤中溶质并不是以相同速率运移的现象。此后,逐渐形成了溶质运移的基本理论——水动力弥散理论。溶质运移理论对于地下水环境保护与资源利用具有重要意义,同时也是土壤和地下水中重金属迁移的基本原理。

1.2.1 土壤重金属迁移模拟

重金属在土壤中的迁移模型主要包括确定性模型和随机模型。确定性模型,即对流-弥散模型(Convective-Dispersive Model),是最常用的模型,其主要应用于受植被、气象、水分和污染源影响的具体微观尺度的模拟研究。随机模型的求解常根据经验简化边界条件,主要应用于区域性的土壤重金属的传输研究。

以下分别介绍确定性模型和随机模型的研究进展,然后总结其不足,并对其发展方向进行展望。

1.2.1.1 确定性模型

确定性模型用来描述由对流和弥散引起的土壤溶质迁移现象。重金属在对流

弥散过程中常伴随有较为强烈的吸附或解吸过程。确定性模型按照土壤溶液流态可分为稳态流 (Steady State) 和非稳态流 [Unsteady State, 或瞬态 (Transient State)] 模型; 按照模型的控制方程解可以分为解析模型 (Analytical)、近似解模型 (Approximate) 和数值解模型 (Numerical)。

(1) 土壤重金属一维对流弥散控制方程为:

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \rho \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[\theta D(\theta, q) \frac{\partial C}{\partial z} - qC \right] - \psi(z, t) \quad (1-1)$$

式中: C 为土壤重金属在液相中的浓度, mg/L ; θ 为土壤含水率, m^3/m^3 ; ρ 为土壤的干容重, kg/L ; S 为土壤重金属在固相中的浓度, $\mu\text{g/g}$; $D(\theta, q)$ 为弥散系数, m^2/s ; q 为水流流速, m/s ; t 为时间, s ; z 为土壤深度, m ; $\psi(z, t)$ 为由植物根系引起的溶质吸收或排出率, $\text{mg}/(\text{L} \cdot \text{s})$ 。

如果假定弥散系数 $D(\theta, q)$ 为常量, 当稳态水流和土壤含水率为常数时, 方程(1-1)可变为:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\rho}{\theta} \times \frac{\partial S}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v \frac{\partial C}{\partial z} - \psi(z, t) \quad (1-2)$$

式中: $v = q/\theta$ 为土壤孔隙中溶液流速, m/s 。

(2) 水分控制方程:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(\theta) \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right] + R(z, t) \quad (1-3)$$

式中: $K(\theta)$ 为土壤水力传导率, m/s ; Φ 为土壤水势, m ; $R(z, t)$ 为植物根系的吸水函数, $\text{m}^3/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$ 。

以方程(1-1)和方程(1-2), 或者方程(1-3)和方程(1-2)为控制方程, 可模拟具有离子吸附或交换的土壤重金属迁移。目前以该模型为基础, 已经对多种重金属在土壤及地下水中的迁移模拟进行了研究。Nofziger 等人开发了一维重金属迁移的数值模拟程序 CHEM FLO。Zheng Honghai 等人用差分法开发了土壤重金属运移 Web 模拟系统。Gour-T 等采用有限元解开发了模拟具有复杂边界条件、考虑微生物及化学物质传输的二维土壤溶质运移模型 2DFA TM IC。

Nedunuri 等通过改进方程(1-1), 并将改进后的方程应用于生物物质和重金属的耦合传输:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \left[C \left[\theta + \frac{x}{K_p} \right] + xC_a \right]}{\partial t} + \rho \frac{\partial C_{sm}}{\partial t} \\ &= \frac{\partial}{\partial z} \left[\theta D \frac{\partial C}{\partial z} \right] - \frac{\partial}{\partial z} [v(z)C] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\theta D_b \frac{\partial C_b}{\partial z} \right] \left[\frac{C}{K_p} + C_a \right] - \frac{\partial}{\partial z} [v(z)C_b] \left[\frac{C}{K_p} + C_a \right] \end{aligned} \quad (1-4)$$

式中: C 为重金属在土壤液相中的浓度, mol/L ; x 为土壤中的总生物物质浓度,

mol/L; K_p 为表面吸附常数, mg/L, 是代表有生物物质被动吸附的比例参数; C_a 为细胞内的重金属浓度, mol/L; C_{sm} 为重金属被土壤吸附的浓度, mol/kg; D 为弥散系数, m^2/h ; D_b 是生物物质的弥散系数, m^2/h ; C_b 是土壤溶液中的生物物质浓度, mol/L。

Simunek 和 Selim 等通过考虑逆向吸附平衡反应和引进延迟因子 R 对方程(1-3)进行了改进, 如方程(1-5)所示。式中, $Q = K_s C$ 为吸收项, $mg/(L \cdot s)$; K_s 为速率系数, $kg/(L \cdot s)$ 。他们建立了一维差分的 HYDRUS-1D、二维有限元的 HYDRUS-2D、以及三维有限元 HYDRUS-3D, 采用 ADI 算法有效减少了计算量。

$$\rho \frac{\partial S}{\partial t} + R\theta \frac{\partial C}{\partial t} = -v \frac{\partial S}{\partial z} + \theta D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - Q \quad (1-5)$$

1.2.1.2 随机模型

随机模型一般应用于区域尺度的土壤重金属传输和平衡模拟研究。Keller 等在 PRO TERRA 经验模型基础上, 对重金属 Cd、Zn 及营养元素 P 在农业土壤中的传输平衡进行了研究, 并建立了随机模型 PRO TERRA-S。该模型的重金属含量控制方程为:

$$\frac{\Delta M_{ij}}{\Delta t} = I_{Atm} + I_{Agr, ij} - Q_L \quad (1-6)$$

式中: M_{ij} 为点 i, j 处的重金属浓度, g/hm^2 ; t 为时间, a; I_{Atm} 是大气沉降引起的重金属输入通量, $g/(hm^2 \cdot a)$; $I_{Agr, ij}$ 为农业活动引起的重金属输入通量, $g/(hm^2 \cdot a)$; Q_L 为重金属渗流通量, $g/(hm^2 \cdot a)$ 。为了估计方程输出的随机性, Keller 等将输入参数视为正态或对数正态分布, 作随机变量处理, 并给出相应的均值与标准差, 如 I_{Atm} 取值为 2.1 ± 0.9 。

对方程(1-6)进一步拓展, 其连续变化函数表达式如下:

$$\frac{dM}{dt} = I_{Atm} + I_{Agr, ij} - k_C M^m - k_L M^{\frac{1}{n}} \quad (1-7)$$

式中: M 为重金属的浓度, g/hm^2 ; k_C 为作物对重金属的吸收率, $1/a$; k_L 为重金属的渗流率, $1/a$; m 和 n 均为常数。另外, 方程(1-7)中的 M 、 k_C 和 k_L 的表达式分别如式(1-8)、式(1-9)和式(1-10)所示:

$$M = \rho z C_i + \theta C_{sz} \quad (1-8)$$

$$k_C = \frac{Y_k}{(\rho z)^{b_{ik}}} b_{ck} \quad (1-9)$$

$$k_L = q_w \left[\frac{1}{\rho z K_f^5} \right]^{\frac{1}{n}} \quad (1-10)$$

式中: C_i 为土壤溶液中的重金属浓度, mg/kg; C_s 为被土壤吸附的重金属浓度, mg/kg; Y_k 为作物产量, $kg/(hm^2 \cdot a)$; b_{ck} 和 b_{ik} 为回归系数; q_w 为达西水流速率,

$L/(m^2 \cdot a)$; K_f 为 Freundlich 吸附模型的参数, L/kg 。

1.2.1.3 存在的问题及展望

弥散系数 $D(\theta, q)$ 是一个随土壤水分含量和溶液流速的变化而变化的函数, 但大多数研究却把土壤水分含量简化为常数。而事实上土壤水分含量由于受气候、耕作等因素的影响而处于不断变化之中, 这样无疑增加了误差。因此, 有必要针对不同区域、不同类型、不同容重、不同土壤溶液组成的土壤, 对弥散系数进行细化研究。

土壤对重金属的吸附 $\partial S/\partial t$ 是确定性模型中影响重金属迁移的重要因子, 而实际应用中对它同样作了过分简化, 将其仅作为重金属浓度的线性或简单函数。因此, 有必要从土壤物理化学角度考虑把相关化学方程引入模型。

随机模型对于宏观尺度环境问题的决策有积极作用, 而这方面的研究与应用力度却都还不够, 因此有必要加大研究投入。

在现有的模拟模型与程序中, 一维模型较为成熟。但实际情况下的污染源、初始条件和边界条件等非常复杂, 且土壤非均质性普遍存在, 因而一维模型很难描述其实际情况。虽然已有二维和三维模型与程序, 但由于受到输入条件及参数设定等的限制, 模型程序应用的灵活性还不够, 因此需要开发更为灵活的应用模型与程序。

另外, 随着计算机科学的发展和信息化的不断深入, 地理信息系统(GIS)与土壤重金属迁移模型的结合和应用也不断发展与完善。在前人研究的基础上, 利用 GIS 等理论与技术, 把对土壤重金属的迁移转化模型与信息化管理有效地结合起来, 这将为环境决策提供新的依据, 也将是今后的研究方向之一。

1.2.2 地下水重金属迁移模拟

1.2.2.1 迁移机理分析

重金属在进入地下环境后, 所发生的迁移过程是一个复杂的物理过程(地下水自身的流动, 地表水、土壤水及雨水与地下水的相互作用, 胶体包含、吸附、过滤、稀释等)、化学及物理化学过程(络合、溶解、沉淀、离子交换、氧化还原、pH 影响(酸碱反应)等)和生物过程(积累、摄取等)。因此, 在研究地下水重金属污染物的迁移规律、建立相关模型时, 必须考虑各个过程及其影响因素。

1.2.2.2 迁移机理实验研究

近年来, 国内外很多学者针对重金属的物理、化学特性, 对其在地下水环境中的迁移机理进行了深入研究。吸附、pH 以及胶体作为重金属迁移的重要影响因素, 历来都受到相关研究者的重视。这是因为人们试图利用一些介质对重金属的强烈吸附来阻滞其向周围环境的扩散, 而吸附又与 pH 及重金属的存在形态(如胶体态)密切相关, 因而在这方面的研究较深入。为了比较地下水中不同重金

属离子的吸附强度及特性,一些研究者对不同种类及价态的重金属吸附特性进行了对比与总结。重金属元素赋存状态也和 pH 存在一定的关系,据研究,在 $\text{pH} < 6$ 时,迁移能力强的重金属主要是以阳离子形态存在的;在 $\text{pH} > 6$ 时,迁移能力强的重金属主要是以阴离子形态存在的。在 pH 较低的时候,大部分重金属的活性较强,即元素的有效态量增加,发生交换吸附的离子就相应地增多,这样就促进了元素的迁移转化。近年来很多学者在不同酸碱环境以及胶体存在状态对重金属迁移影响规律进行了研究。Luhmann L, Thomas Baumann, Stefan Muller 以及 Anke Wolthoorn 等,针对地下水中胶体吸附对溶解态重金属 (As^{5+} 、 Cd^{2+} 、 Co^{2+} 、 Cr^{3+} 、 Cu^{2+} 、 Ni^{2+}) 迁移的影响,以及 Fe 在地下水胶体中的存在形态及其迁移能力进行了各种实验与深入研究。

腐殖酸、有机质等的存在,与重金属的迁移能力也存在很大的关系。由于有机质中含有羟基、羧基、烯醇基、磺酸基、氨基等多种能与某些重金属形成稳定的络合物或螯合物的活性基团,因而有机质高的地下水中的重金属迁移能力较弱。很多学者对这方面进行了研究,如 Suiling Wang 和 Catherine N Mulligan 以某矿山尾矿下受重金属污染的地下水为例,研究了腐殖酸对 As、Cu、Pb 和 Zn 迁移能力的影响;Wang 和 Mulligan 分析了 NOM 对 As 从土壤或沉积物向地下水迁移的影响;Molla Demlie 通过 SE (Sequential Extraction) 方法对 Cr、Cd、Pb、As、Cu、Ni、Zn 和 Co 在不同化学环境(硫酸盐、铵盐、碳酸盐、弱酸、弱碱)中的迁移能力进行了分析,认为 Ni 与 Co 可能以沉淀形式迁移。Fe、Mn 共存环境下也存在复杂的地球化学过程,并影响两者的迁移。

另外,在考虑地表径流等影响因素的情况下,Dorothy J Vesper、William B White、Frank Winde 等研究了暴雨径流、地表溪流对地下水环境改变(pH、氧化还原电势、电导率)情况下重金属(As、Cd、Cr、Ni、Pb、U)迁移的影响。Stumm W 和 Thomas J Schroder 等研究了氧化还原环境对重金属迁移的影响。国内河南理工大学和焦作市环保局于 2001 年联合完成了焦作市地下水中 Cr(VI)的迁移机理研究。

根据地下水重金属的迁移机理的不同,地下水重金属迁移模拟的模型大致可分为应用于具体微观尺度的确定性模型、大面积区域性尺度的随机模型以及其他模型三大类。这些模型与近代描述地下水运动的数学模型是相对应的,是建立在地下水运动理论的基础上的。但地下水重金属污染物的迁移要比地下水运动更为复杂。

1.2.2.3 确定性模型

根据质量守恒定律,把溶质迁移的 3 种机制(对流、扩散、水动力弥散)同连续性方程结合,可得到溶质运移的对流 - 弥散方程(Convective - Dispersive Equation, CDE),Nielson 首次系统地论述 CDE 的科学性和合理性。确定性模型就是基于 CDE 方程的,最早由 Streck 和 Richter 提出,然后由 Ingwersen 进行了修改。上述研究者将该模型与土柱实验相结合,对 Cd 在小尺度区域内的迁移进行

了模拟预测,并取得了很好的效果。该模型由基本的对流-弥散方程和相应的辅助方程构成,通过由质量守恒和流动定律导出的微分方程估计随时空变化而变化的水分和溶质的含量,以达到描述污染物迁移过程的目的。模型中的参数、变量及边界条件都是确定的。每次模拟模型也仅能给出唯一但确定的输出。

确定性模型主要由两部分组成:

(1) 水运移方程

由于重金属有很强的吸附特性,并且不能被生物所降解,因此局部的重金属地下水溶质运移可看成是在土壤(岩石)-水稳定混合态中的迁移。一维局部水平衡方程如下:

$$\frac{\partial q}{\partial z} + W(z) = 0 \quad (1-11)$$

(2) 重金属污染物运移方程

一维对流弥散控制微分方程可表述为:

$$\theta \frac{\partial C}{\partial t} + \rho \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_s \frac{\partial C}{\partial z} \right) - q \frac{\partial C}{\partial z} \quad (1-12)$$

式中: C 为重金属在液相中的浓度, $\mu\text{g/L}$; $D_s = \lambda q$ 是弥散系数, m^2/d , 且 λ 为弥散距离, m ; S 为重金属的吸附浓度, $\mu\text{g/kg}$, 与 C 和固相性质如 pH 、 C_{org} 、黏土含量等有关; θ 为固相(土壤或岩石)含水率; ρ 为固相干容重, kg/L ; t 为时间, d 。

目前以式(1-11)和式(1-12)为控制方程的确定性模型为基础,国外已经对多种重金属在地下水中的迁移进行了模拟研究。近年来国内在这方面的研究也较多,朱峰在薛禹群于 20 世纪 70 年代建立的越流系统的水流方程的基础上,提出了考虑弱透水层弹性释水作用的越流系统水流模型,并在考虑上、下含水层固体骨架对污染物的吸附,及弱透水层本身对污染物的吸附作用的基础上,对太原盆地地下水汞污染及迁移进行了数值模拟。冯绍元等通过实验表明,对流弥散方程能较好地模拟排水条件下 Cd 在地下水(饱和土壤)中的运移过程。肖利萍等使用该模型深入研究了煤矸石淋溶液对地下水系统的污染规律。

确定性模型一般适用于均质非饱和多孔介质中稳态或非稳态流的溶质运移,是溶质与多孔介质不发生吸附-解吸等化学反应,又不考虑其他汇源项条件下的数学表达式。然而实际情况中,多孔介质中存在死端空隙、流动通道,以及优先通道等。为此,Coats 和 Smith 对 CDE 方程进行了修正,在 1964 年首次提出了描述可动水体与不可动水体的两区模型。Gerke 和 Van Genuchten(1993 年)提出了优先流、双空隙体系的概念和数学模型。Simunek(1999 年)改进了 CDE 方程,引进了延迟因子 R ,并考虑到逆向吸附平衡反应,建立了基于 Web 的一维差分计算程序 HYDRUS-1D。

后来,人们开始将地球化学模拟与描述流体流动和溶质迁移过程的数值模拟

结合起来,发展成了“反应-运移模型(Reaction-Transport Model)”或“水化学模型(Hydrochemical Model)”“水文地球化学模型(Hydrogeochemical Model)”。过去,水动力模型和地球化学模型是各自独立发展的,这一模型的提出使耦合模型得以发展,其发展的动力在于人们非常关心化学污染物在地下的迁移。国外的一些研究者将这一迁移模型运用到重金属地下水迁移研究中来,比如 Thomas Baumann 等对重金属(Fe、Mn、Cd、Co、Cu、Ni、Pb、Zn)在垃圾填埋场附近的地下水胶体中的迁移进行了分析。最近,基于过程的反应-迁移模型(Process-based Reactive Transport Model)成为了研究地下物质迁移的重要模型,这一模型充分考虑了物理、化学、矿物、地质以及生物等影响因素的相互作用。

近年来,确定性模型中对流-弥散方程的求解技术越来越成熟,且产生了很多求解手段:欧拉-拉格朗日法(Eulerian-Lagrangian Method)、有限元法(Finite Element Method)、有限差分法(Finite Difference Method)、边界单元法(Boundary Element Method)、模糊数据集法(Fuzzy Sets Approach),以及人工神经网络法(Artificial Neural Networks Method)等。

目前,国际上最具影响力的基于确定性模型开发的模拟软件主要有:MODFLOW、MT3D、MT3DMS、PEST、FEFLOW、Visual Groundwater、GMS、PHAST1.2、FLOTRAN、Compac、EDGIS、PHREEQC2 和 PHREEQM 等。

本书总结了近年来有关模型的最新研究方法和应用进展。K Syrovetsnik AE 对泥炭沼污染的地下水重金属(Fe、Cd、Cu、Mn、Ni、Pb 和 Zn)的积累、迁移建立了概念模型和地球化学模型。M O Schwartz 和 AE J Kgomanyane 使用 PHAST1.2 对矿区地下水中的 Ni、Cu 和 Co 进行了三维反应迁移模型分析。James G. Brown 使用 PHREEQC 对大型矿区酸性废水污染的地下水中重金属(Al、Cu、Mn 和 Zn)的迁移进行了模拟。Steven F Thornton 通过土柱实验和 PHREEQM 软件分析了垃圾填埋场浸出液中的 Mn 和 Fe 向地下水迁移的化学影响因素和化学反应模型。Brownetal 和 Kjolleretal 对饱和区地下水重金属迁移进行了一维多组分水文地球化学建模。Walter 对主要化合物及重金属建立了饱和区地下水垂直方向二维迁移模型。Kent 和 Curtis 结合地下水二维反应迁移模型和半经验地表络合模型(Semi-Empirical Surface Complexation Models)对重金属吸附作用进行了研究。Bas van der Grift 综合非饱和区、饱和区重金属迁移模型,对 As、Zn、Ni、Cr、Cu 和 Pb 在非饱和区及饱和区的整体迁移进行了三维建模。

1.2.2.4 随机模型

目前构建地下水溶质运移数学模型面临的最大困难是模型参数的选择,例如含水层渗透系数的确定。野外实际条件下的含水介质表现出强烈的空间变异性,因而单纯地使用确定性方法来研究问题往往得不到很好的结果。含水介质复杂的变异性迫使我们必须把含水介质作为一种随机变量处理,这就需要求助于随机模

型。随机模型在求解中常根据经验简化相应边界条件,因此也称经验随机模型,主要用于大面积区域性重金属在土壤及地下水传输的研究。大量的野外大尺度溶质运移试验的研究成果表明,渗透介质的空间变异性是影响溶质运动的决定性因素。为了解决水文地质参数的这一特性,Dagan、Neuman S P、Russo D 以及 Jury 等提出并发展了随机理论的研究方法。

质点从多孔介质中某一点进入,大体上沿流向的轨迹运动,但由于各种随机因素的影响则可能偏离轨迹。若投入重金属污染物质的浓度为 C_0 , A 点的浓度为 $C(n, k)$, 则 A 点的概率为:

$$P_{(n, k)} = \frac{C_{(n, k)}}{C_0} \quad (1-13)$$

式(1-13)所表示的分布函数是一个不连续的函数,因为 n 和 k 都只能是整数。可以通过简单的修正使其变为连续函数:令 $x = \gamma_1 \cdot k \cdot d$; $y = \gamma_2 \cdot n \cdot d$ 。式中 γ_1 和 γ_2 分别指 x 轴和 y 轴的介质材料系数,对均匀介质 $\gamma_1 = \gamma_2$; d 为孔隙介质的颗粒直径。经变换便可以得到连续分布的公式:

$$C_{(x, y)} = \frac{0.8C_0 \sqrt{\gamma_2 d}}{\sqrt{y}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\lambda_1 y d}\right) \quad (1-14)$$

近二十多年来,随机理论迅速地被应用于地下水中污染物运移等领域的研究,并取得了一些突破性的成果,从而改变了人们对化学物质在地下水中运移、弥散的传统认识,并使随机方法成为研究非均质含水层中地下水流和重金属溶质运移问题的重要手段。国外学者 Sven Altfelder、Wilhelmus H M Duijnisveld、Thilo Streck 等对确定性模型和随机模型进行了比较,并用随机模型对 Cr、Cd、Cu、Pb 和 Zn 等重金属在地下水中的迁移进行了研究。

1.2.2.5 其他模型与方法

近年来,除了确定性模型和随机模型外,还出现了一些其他模型,如 Boguslaw Buszewski 和 Tomasz Kowalkowski 综合运用土柱实验与人工神经网络方法,对重金属迁移进行了研究,且将研究成果应用于土壤-地下水系统中重金属的污染评价。Stefanie Hellweg 和 Thomas B Hofstetter 提出运用 LCA (Life - Cycle Assessment) 方法对矿渣废物浸出液中的 Cd^{2+} 和 Cu^{2+} 污染与迁移进行建模和评价。而 Winfried Schroder 则提出运用 GIS 手段建立重金属在大气-土壤-地下水系统中的迁移模型及风险评价。

1.2.2.6 存在的问题及展望

重金属在地下水中迁移的模拟及预测离不开数学模型的建立,数学模型的好坏直接影响到模拟及预测的结果。因此数学模型对地下水中重金属的迁移机理与模型的研究具有很强的理论意义与现实意义:①将模型计算的结果应用于重金属空间分布、重金属污染影响评价等方面的研究而不用进行大规模的采样分析,从

而可以节省时间、人力和物力等;②根据模型计算结果,可以预测地下水质未来的变化趋势;③可以在灾害发生之前,为环境部门及时对地下水进行防治的时间和地点的选择提供科学的决策依据和数据支持。

地下水介质有3种类型:孔隙介质、裂隙介质和岩溶介质。目前,对重金属在孔隙介质中迁移的研究较多,而在裂隙介质和岩溶介质中迁移的分析则很少,并且研究主要集中于潜水区,而承压区和越流区的研究则较少。

现有模型大多是在某种环境特征下的具体、微观、零碎的研究,并没有将实际情况下的物理、化学、生物等过程联系起来综合研究,对区域性地下水重金属迁移的机理分析较少,缺乏对区域性地下水重金属的污染源、污染途径及污染特征的综合分析。而随机理论正好是溶质运移模型从“点”尺度向“区域”尺度扩展的重要手段,也是目前国际上研究的热点之一。但是地下水水质模型中,确定性模型较多,随机模型较少,将随机模型应用于地下水重金属迁移的研究则更为少见。因此对重金属迁移区域性模型和随机模型的研究将是今后的发展趋势。

在模型的建立过程中,参数确定的准确性和对参数尺度效应的研究是很重要的,是重金属在地下水迁移转化规律模拟计算中的关键问题。模型参数测定过程中的许多技术问题、参数确定的准确性和可靠度以及参数的尺度效应等都有待于进一步探索和研究。

随着污染的加剧,地下水中重金属污染物在迁移过程中发生的物化反应和有微生物参加的生物化学作用所可能造成的对人体健康的影响将成为人们日益关注的焦点。另外,目前国内外在地下水重金属迁移转化的数学模型中,几乎没有关于重金属生物累积的数学模型。这主要是因为水体中的重金属与其他污染物不同,它不能被生物所降解,相反的,某些生物可以富集重金属,并且把某些重金属转变成毒性更大的金属——有机化合物,这将在一定程度上增加问题描述和数学求解的难度。因此,考虑物化反应、生化作用及生物累积的地下水重金属的迁移模型将是另一个研究趋势。

近几年来,随着GIS技术的发展和普及,其本身空间分析功能和相关学科的迅猛发展,使其应用领域不断拓宽。如何充分利用GIS在数据采集、存储、处理和可视化表达在地下水污染物迁移数据分析和模拟等重要环节上的优势,把GIS与地下水重金属迁移建模紧密集成起来,使其为建模工作提供更为简单、适用、高效的新方法是未来的研究方向之一。

另外,由于地下水系统的复杂性,研究问题具有不确定性、非线性、高维度、参数多、约束条件隐含性大等特征,因而传统方法已远远不能满足要求,这就需要人工智能算法等新的优化方法才能解决问题。因此这也是将来的研究方向之一。

总之,近二十多年来,国内外对地下水重金属迁移的机理与模型研究已经较多,尤其是利用确定性模型对几种重要的重金属的迁移规律进行了研究。我国于

20 世纪 80 年代初才开始研究污染物在含水层中的迁移问题,在重金属地下水迁移方面的研究还不够深入,在这方面的科研投入还有待进一步加强。根据重金属的理化性质,总结分析重金属在地下水体中的污染机理,通过数学模型研究其在水体中的迁移规律,完善重金属迁移转化数学模型,进而为地下水重金属污染的控制和治理工作提供技术支持,都将需要国内外的相关学者们付出更多的努力。

1.2.3 铬在环境中的迁移模拟

1.2.3.1 铬在环境中的价态

铬可以以 0 ~ +6 的化合价态存在,在自然环境中通常只以三价和六价两种稳定价态出现。三价铬 Cr^{3+} 、 $\text{Cr}(\text{OH})^{2+}$ 、 $\text{Cr}(\text{OH})_3$ 、 $\text{Cr}(\text{OH})_4^-$ 、 $\text{Cr}(\text{OH})_5^{2-}$ 以及 $\text{Cr}(\text{III})$ 与其他有机或无机基团配合形成的离子,可能被土壤颗粒吸附,使其在土壤中的活动性差,故不易被植物吸收。因此,土壤 pH 对 $\text{Cr}(\text{III})$ 的存在形式有极大影响。

1.2.3.2 土壤中铬的迁移与模拟

大气、水体、土壤和生物间铬的迁移转化主要由沉淀、溶解、氧化还原、吸附和解吸等过程决定,其迁移非常活跃。大气中的含铬尘埃可因重力沉降或降水作用迁移至土壤和水体。含铬污染物随水流迁移扩散使周围土壤和水域中铬含量增加。土壤类型、孔隙率、含水率等对铬的迁移转化有重要影响。土壤吸附 $\text{Cr}(\text{III})$ 能力为 $\text{Cr}(\text{VI})$ 的 30 ~ 300 倍。 $\text{Cr}(\text{III})$ 和 $\text{Cr}(\text{VI})$ 的被吸附程度均因土壤和黏土矿物的类型而异。傅臣家通过批量平衡试验,研究了 $\text{Cr}(\text{VI})$ 在土壤中的吸持反应,对动力学模型与吸持等温线平衡模型进行了拟合研究;通过土柱试验,获得了 $\text{Cr}(\text{VI})$ 在排水条件下饱和土壤中的迁移转化参数和分配规律,并用 HYDRUS-1D 模型对试验数据进行了模拟,对不同灌溉行为条件下 $\text{Cr}(\text{VI})$ 的迁移转化进行了预测,并提出了再生水灌溉条件下 $\text{Cr}(\text{VI})$ 的水质标准。另外, Khan 等通过批量室内实验,对 $\text{Cr}(\text{VI})$ 在土壤介质中的吸附与解吸特性进行了深入研究。

1.2.3.3 地下水中铬的迁移、模拟及存在的问题

实验证明, $\text{Cr}(\text{III})$ 化合物进入土壤后 90% 以上被土壤迅速吸附固定,因而其对地下水的危害较小。但在 pH 为 6.5 ~ 8.5 的条件下,土壤中的 $\text{Cr}(\text{III})$ 被氧化成 $\text{Cr}(\text{VI})$, 因此土壤中的 $\text{Cr}(\text{III})$ 可给地下水带来潜在的危害。在地下水中,铬酸根离子(CrO_4^{2-})和重铬酸根离子($\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$)是氧化态 $\text{Cr}(\text{VI})$ 的主要存在形式。铬酸盐矿物极易溶于水,由于铬酸根离子带负电,而大多含水层矿物也带负电,因此铬酸根离子因难被含水层矿物吸附而具有较高的迁移能力。所以, $\text{Cr}(\text{VI})$ 在地下水中的含量高。赵万有等通过专项调研,全面剖析了铬渣中的 $\text{Cr}(\text{VI})$ 对地下水、土壤、蔬菜的污染规律。李志萍等人通过设计室内和野外试验,研究了污染河流中铬对浅层地下水的影响。其室内模拟试验通过选用 3 种天然砂土为渗透介

质,探讨铬在不同渗透介质中的迁移转化的机理和规律;其野外试验以北京凉水河为例。宋国慧等人采用野外现场试验与室内分析、测试相结合的方法对铬在包气带的垂直污染机理及对地下水污染的影响进行了研究。郭媛媛采用实验室模拟的方法,研究了地下含水层中固相介质、金属浓度、pH、离子强度、微生物活动、时间以及共存镉等影响因素对铬在模拟地下含水层中迁移转化的影响。位菁以湖北省某大型无机盐厂的两个铬渣堆为主要研究对象,综合运用野外调查、室内实验和数值模拟等多种方法,对比分析了新鲜铬渣与风化铬渣的形貌、矿物组成特征及浸出规律,建立了淋滤作用下铬渣中的 Cr(VI) 在地下水中迁移的反应-输运模型,预测了 Cr(VI) 在地下水中的迁移情况和经历的水文地球化学过程。Shen 等综合考虑铬在地下水中的溶质运移与地球化学反应两个方面,建立了一维多组分运移模型,并在此基础上基于多网格有限差分方法建立了三维地下水运移模型。该模型集成了络合、降雨和溶解等过程,能模拟不规则边界和地下水水位的变化起伏,其运行时间比 MODFLOW 节省约 30%。

总体而言,国内外虽然对于重金属及营养元素在环境中的迁移研究很多,但针对铬元素的迁移研究并不多。

1.3 人类健康风险评价

1.3.1 基本概念

人类的健康与周围环境息息相关。据统计,近年来全国每年新发脑血管疾病和恶性肿瘤人数分别达 150 万和 160 万,并且 90% 的癌症由化学致癌物引起。另外,全球各类污染事故也越来越多,例如 1986 年的切尔诺贝利核电站泄漏、近年来我国的吉林松花江污染和湖南浏阳镉污染等,都给人类健康造成了巨大的危害,成为制约我国经济发展的重要因素。

环境风险评价可以分为生态风险评价和人体健康风险评价两大类。人体健康风险是把环境污染与人体健康联系起来的一种新的评价方法,是对人体暴露在危险环境下可能产生的负面健康影响的特征描述。

1.3.2 发展历史及研究概况

20 世纪 30 年代,出现了以毒理学为基础的风险评价。健康危险评定的安全系数法于 20 世纪 50 年代被首次提出。20 世纪 70 年代初,对人类和生态系统造成不利影响的危害评价开始被提出。20 世纪 80 年代以后,健康风险评价逐渐兴起,对化学物质危害的评定开始由定性向定量发展。1995 年以前,健康风险评价中暴露风险的研究内容主要集中在常规大气污染物和挥发性有机污染物,研究对

象主要为成年人。1996 年至 2000 年, 研究内容扩展到金属、杀虫剂、多环芳烃、二噁英气溶胶以及膳食暴露与暴露模型, 研究对象也开始涉及到老人和儿童等敏感人群; 2001 年至今, 暴露评价的研究开始特别关注儿童被暴露在杀虫剂和气溶胶等的环境中, 并涉及电磁和微波辐射等新兴环境污染的暴露问题。

健康风险评价以美国国家科学院(National Academy of Sciences, United States)和美国国家环境保护局(U. S. Environmental Protection Agency, USEPA)的成果最为丰富。美国国家科学研究院于 1983 年编写了《风险评价在联邦政府: 管理过程》红皮书, 该书综合了当时的评价方法, 并提出健康风险评价的“四步法”作为开展风险评价的技术指南: 危害鉴别、剂量-效应关系评价、暴露评价和风险表征。该方法目前已被多个国家和国际组织所采用。随后, 美国环保局根据该红皮书制定并颁布了一系列文件、准则和指南, 包括《致癌风险评价指南》《致突变风险评价指南》, 以及 1986 年提出的《风险评价指南》。我国卫生部和农业部于 1991 年联合发布了《农药安全性毒理学评价程序》。另外, 我国还制定了《职业性接触毒物危害程度分级》(GB 5044—85)、《工作场所有害因素职业接触限值》(GBZ 2—2002) 等用于健康风险评价的标准。此外, 联合国粮食及农业组织(Food and Agriculture Organization, FAO) 和世界卫生组织(World Health Organization, WHO) 通过农药残留联席会议来合作评估食品中农药的残留特征。20 世纪 80 年代后期, 以美国为代表的一些国家通过建立数据库, 致力于数学模型的开发与应用, 以期科学、准确、全面、迅速地开展风险评价。

我国的健康风险评价研究起步于 20 世纪 90 年代, 主要在于介绍和应用国外的研究成果。胡二邦、孟宪林、胡应成、杨晓松以及曾光明等对健康风险评价的方法 and 不确定性进行了解释与描述。彭金定等对长沙铅冶炼厂周边地区、城镇、乡村水源和空气进行了铅污染调查, 并对人群的血铅浓度进行了测定和评价。肖风劲等以我国森林生态系统为例, 探讨了森林健康生态风险评价的研究方法, 并以森林火灾、病虫害和酸雨为生态风险源, 运用生态风险评价方法, 分析了这些风险源对森林健康的主要危害, 对我国森林健康的风险进行了综合评价, 并提出了针对不同森林风险区的管理策略。仇付国对典型城市污水及再生水中污染物质的分布规律进行了深入考察, 主要内容有: 结合各种再利用方式, 分析了污染物的暴露途径; 在吸取国外经验的基础上, 进行了主要污染物的剂量-反应关系分析; 建立了适合我国国情的城市污水再生利用化学物质和病原微生物健康风险评价模型; 通过生物示踪剂试验等先进手法评价了各种处理工艺对病毒的去除效果。李静以地统计学和 GIS 为研究手段, 选择蔬菜地和矿区中的土壤重金属, 及杭嘉湖平原土壤中的氟为研究对象, 利用不同的评价方法和标准来对土壤的环境质量进行定量化评价, 系统地探讨了健康风险评价方法及标准在不同土地利用方式下土壤重金属环境质量评价中的应用, 并对土壤中氟的评价方法和健康标准进

行了探讨,且推测了其含量的健康极限值。李梅对河流系统健康风险、河流健康的径流条件和河流健康的风险和危机预估等问题进行了系统研究。她在解读了风险与不确定性概念的基础上,对河流系统健康风险概念给出了新的界定;分析了河流健康风险的各种影响因素之间的联系,以及多种影响因素的综合效应,并对某些因素的影响进行了定量分析;结合河流健康风险分析的特点,系统地开展了风险扩散的理论与方法、河流健康的径流条件确定方法、河流健康的风险-危机度预估方法等的研究,并应用于黄河健康的风险分析。柴立元和王振兴等利用地统计方法、GIS技术与TIN模型对2002年至2008年间湘江流域地下水中的As、Cd、Cr、Cu、Fe、Pb、Mn和Zn等重金属污染引起的居民健康风险进行了变化趋势分析与模拟。王振兴等以湘江流域地下水中As和Cd污染物引起的健康风险为例,为我国的地下水环境质量标准的设定提出了合理建议,并针对环境管理与决策提出了有效的方案。另外,王振兴等用主成分分析、地统计学原理、GIS技术、TIN模型以及序贯高斯随机模拟方法对长沙市的土壤重金属As、Cd、Hg、Ni、Pb和Zn的污染来源,直接和间接暴露引起的健康风险进行了评价、模拟与空间分析,识别与评价了高风险区域,以及对敏感人群(儿童)在各种不同的暴露途径下受到的健康风险做了对比与分析。另外,王宗爽等在借鉴和参考美国国家环境保护局(US EPA)建立的暴露参数的方法学基础上,探讨了我国居民呼吸、饮食、皮肤等的暴露参数,其结果表明我国居民的各种暴露参数与美国相差了2.5%~33.3%。

1.3.3 存在的问题及展望

近年来,随着许多新型研究手段和方法的不断发展及其在健康风险评价中的应用,人类健康风险评价理论与技术也在不断地发展进步。各种影响因素,如累积影响、发病率、代际影响、致死风险、区域与国家间差别等都是以往研究的不足之处。当前健康风险评价研究的难点和焦点主要集中于化合物的多途径暴露、多种化合物的联合暴露、历史暴露的定量估计和暴露评价的有效验证等方面。

今后健康风险评价将进一步向以下四个方面发展:①暴露定量的准确性。进一步研究基于个体的暴露测量技术、个体有效性暴露生物标志物评价技术和新方法,如时间-活动模式等,开发对多途径和多种化合物联合暴露的评价模型和方法以及暴露验证方法,不断提高暴露评价定量的准确性;②暴露评价时间范围的推广。应用暴露再现评估方法、先进的模拟方法和新型的数理统计模型和方法等,实现对历史暴露的定量估计和对未来暴露的有效预测;③暴露评价空间范围的扩大化。应用地理信息系统(GIS)和空间分析技术等方法,扩大了健康风险评价的地域尺度,实现基于群体的定量暴露评价;④暴露评价应用领域的拓宽。人类健康风险评价将逐渐在有毒有害化学品的安全性评价、突发性环境污染事故和自然灾害应急过程等工作中发挥更为重要的作用。

1.4 GIS 与环境科学的结合前沿

地理信息系统 (Geographic Information System, GIS) 产生于 20 世纪 60 年代, 是在计算机软件、硬件支持下, 运用系统工程和信息科学的理论与方法, 综合、动态地获取、存储、管理、分析和描述与地理空间有关数据的空间信息系统, 是集地理学、信息科学、计算机科学、地图学、环境科学、城市科学和管理科学等为一体的新兴边缘学科, 其优势在于数据综合、空间分析和地理模拟。目前, GIS 已经广泛应用于环境监测、灾害评估、城市与区域规划、资源管理等众多领域。

Goodchild 于 1993 年在《Environmental Modeling with GIS》一书中详细阐述了 GIS 在环境建模中的作用。近年来, GIS 的迅速普及和推广为其在环境建模中的应用开拓了广阔的前景。与传统技术相比, GIS 可使模型的输入与输出数据更加便捷地被获取、管理和显示; 可使建模者对复杂环境中不同尺度的空间信息进行检验, 以及对不同数据源进行整合。

20 世纪 70 年代, 美国田纳西流域管理局利用 GIS 技术为流域管理和规划提供决策服务。20 世纪 80 年代, 已有应用 GIS 于水文学和水资源管理的系统与理论研究成果出现在美国测绘研究会和美国摄影测量与遥感学会的交流中。1993 年, 美国亚拉巴马州莫比尔市举行了涉及地下水模型、水质和水资源利用等问题的“地理信息系统和水资源专题讨论会”。同年, 国际水文科学协会召开了“地理信息系统在水文学与水资源管理中的应用专题会”, 并于 1995 和 1996 年召开了 GIS 应用于水资源系统模拟与管理专题学术会议。Wong 分析总结了 GIS 在城市金属污染管理中的发展与应用。Giupponi 和 Vladimirova 利用 GIS 建立了欧洲尺度的农业水环境的污染管理模型 Ag-PIE。Barra 将 GIS 与 SoilFug 模型相结合用于流域尺度的地表水杀虫剂的污染预测。Zamorano 等利用 GIS 进行城市垃圾填埋场的选址。另外, 美国大气污染仿真系统、纽约城市交通空气污染综合模拟系统、Zhang 将一维溶质运移模型 CMLS (Chemical Movement in Layered Soils) 与 GIS 结合、Liao 和 Tim 将 Meeks 和 Dean 建立的淋溶潜力指数模型 (Leaching Potential Index) 简化并在 GIS 中重新建模等都是 GIS 与环境管理工作结合的实例。

GIS 在我国起步较晚, 但是发展迅猛。20 世纪 80 年代后期, 我国环境保护部门已陆续开展了各种形式和规模的 GIS 研究与应用。近年来, GIS 与环境科学的结合变得越来越紧密和深入。

虽然 GIS 在环境领域中的应用已经取得了一定的成绩, 但还远远不能满足环保事业的发展需求。因此, 需要发展能够向社会提供全方位的环境地理信息服务的国家级环境地理信息系统 (Environmental GIS, EGIS), 以满足日益增长的环境空间信息处理的迫切需求。

1.5 研究目的、意义、内容及思路

1.5.1 研究目的和意义

由于重金属铬的过度开发利用,且其不能被生物降解等原因,我国在开采、加工、生产和应用等各个环节产生的大量含铬废渣使环境污染问题日益突出。由于环境累积性、生物吸收与富集性、食物链的传递性等作用,使铬污染物与人体接触或被吸收,这将对人体健康造成危害。因此,本书针对我国铬渣的成分与堆放特征,结合GIS的环境数据管理和空间分析技术,系统地调查与分析Cr(VI)在铬渣、土壤和地下水中的迁移规律、暴露途径、暴露水平及健康风险特征,深入地铬渣、土壤、蔬菜、地下水中Cr(VI)可能对人类健康产生的风险进行评价与预警研究,建立基于GIS、集成迁移模型、区域动态的环境风险评估预警综合管理平台,提出污染防治与管理对策,这对于改善环境质量、控制重金属的食物链传递、修复与治理污染区域以及保护人类自身的健康,及在理论与实际应用上均具有重要的意义。

1.5.2 研究内容与方法

本书涉及的研究内容与方法如下:

(1) 铬渣-酸雨相互作用溶解释放规律及仿真模型研究

采取静态和动态降雨模拟淋溶方法,分析影响铬渣中Cr(VI)污染物溶解释放的因素,探讨其溶解释放规律与动力学机理,利用回归方程、人工神经网络等理论对污染物淋溶释放进行模拟仿真,利用遗传算法等对模拟仿真模型进行优化。

(2) Cr(VI)在土壤中的吸附、迁移规律及模拟研究

通过等温吸附法等对土壤中Cr(VI)污染物的吸附特性进行研究;通过分析对流、弥散等水动力作用,利用土柱淋滤等方法对Cr(VI)在土壤中的迁移参数与机理进行研究;综合考虑吸附与水动力作用,建立数学模型以对土壤中Cr(VI)的空间分布规律进行模拟预测,对铬渣酸雨淋溶液中Cr(VI)在土壤中的迁移及对地下水的危害进行模拟与预测。

(3) Cr(VI)在地下水中的迁移规律及模拟研究

对铬渣淋溶液经土壤进入地下水中的迁移机理进行实验分析,建立Cr(VI)污染物在地下水系统中的迁移转化模型,揭示其时间、空间特征与演变规律,并评价其健康风险。

(4) Cr(VI)在渣、土壤、蔬菜及地下水中的健康风险评价及风险评价的时空拓展研究