ICS 13.020.40
CCS Z 00

T/SSSC

中 国 土 壤 学 会 团 体 标 准

T/SSSC 013 —2025

基于 HYDRUS-1D 的土壤有机污染物包气带衰减因子估算技术指南

Technical Guidelines for Estimating the Vadose Zone Attenuation Factor of Soil Organic Pollutants Based on HYDRUS-1D

2025-04-15 发布 2025-04–16 实施

中国土壤学会 发 布

目　　次

前　　言 3
1 范围 4
2 规范性引用文件 4
3 术语和定义 4
3.1 包气带衰减因子 Vadose Zone Attenuation Factor （AF） 5
4 总体要求 5
4.1 化合物类型特异性 5
4.2 情景特异性 5
5 有机污染物包气带衰减因子估算方法框架 5
6 数据收集 6
6.1 一般规定 6
6.2 确定数据需求 6
6.3 明确数据来源并获取 6
6.4 数据预处理 8
7 概念模型构建 8
7.1 一般规定 8
7.2 空间离散化 8
7.3 时间离散化 9
8 有机污染物包气带运移模拟 9
8.1 一般规定 9
8.2 参数设置 9
8.3 包气带污染物运移模拟 10
9 浓度衰减因子计算 10
附录 A HYDRUS-1D 软件包气带污染物运移模拟输入参数及数据来源 12
主要参考文献 14

前　　言

本标准按照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。

本标准由中国科学院生态环境研究中心提出。

本标准由中国土壤学会归口。

本标准起草单位：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。

本标准主要起草人：王美娥、张雪云、王一恒、马万凯、谢天、吕斯丹、陈卫平。

基于 HYDRUS-1D 的土壤有机污染物
包气带衰减因子估算技术指南

1 范围

本标准规定了基于HYDRUS-1D的土壤有机污染物包气带衰减因子估算技术的范围、规范性引用文件、术语和定义、总体要求、有机污染物包气带衰减因子估算方法框架、数据收集、概念模型构建、有机污染物包气带垂直运移过程模拟以及包气带衰减因子计算。

本标准适用于有机物污染的土壤-地下水系统风险评价和基于地下水安全的土壤有机污染物安全阈值推导。

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标准必不可少的条款。其中，注日期的引用文件，仅该日期对应的版本适用于本标准。凡是不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本标准。

GB 14148	地下水质量标准
GB/T 50123	土工试验方法标准
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标准。

3.1 包气带衰减因子 Vadose Zone Attenuation Factor （AF）

土壤表层孔隙水与包气带下层土壤溶液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

本标准基于溶质垂直运移模型HYDRUS-1D模拟化合物淋溶过程，要求化合物在土壤剖面的浓度能够达到平衡状态。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

假设的情景为污染物通过包气带淋溶过程的情景。包气带衰减因子的计算中不考虑地下水的扩散稀释。

5 有机污染物包气带衰减因子估算方法框架

有机污染物包气带衰减因子估算方法框架主要包括：（1）数据收集；（2）概念模型构建；（3）有机污染物包气带运移过程模拟；（4）包气带衰减因子计算。方法框架如图1所示。

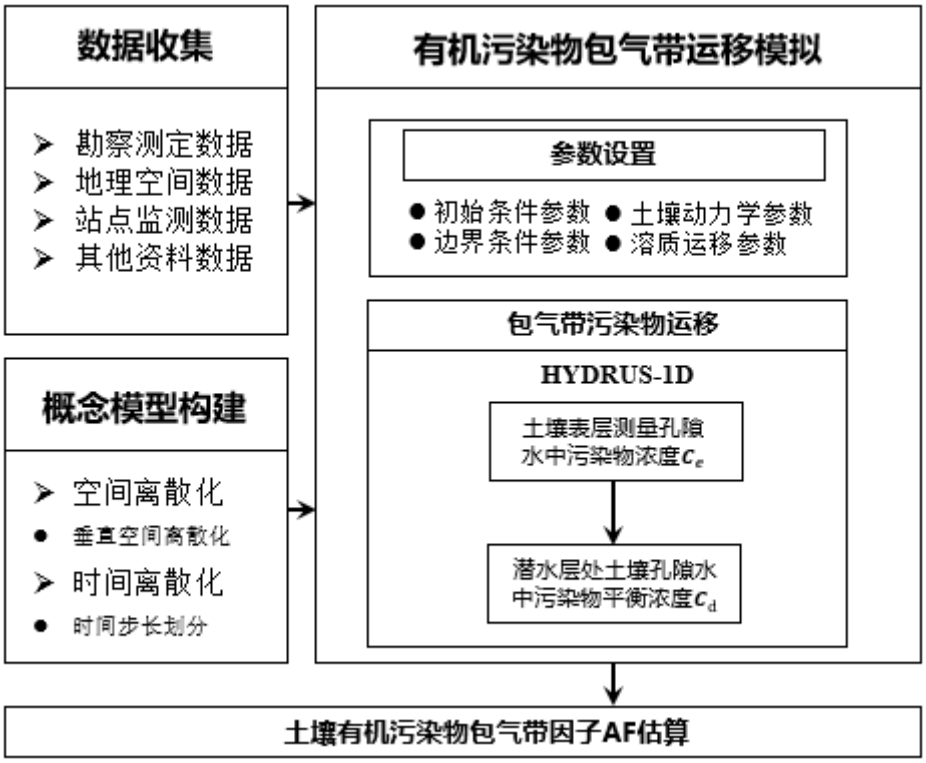

图 1 土壤有机污染物包气带衰减因子估算方法框架

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。本方法使用了 HYDRUS-1D 模型，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 模型所需参数，确定土壤有机污染物包气带衰减因子估算方法所需数据，包括与模型初始条件参数、水流运移，溶质运移，以及模型可变条件相关的参数数据。模型参数设置详见第 8 章及附录 A。

6.3 明确数据来源并获取

根据模型所需数据来源不同，将所需数据分为 4 类：（1）勘察测定数据；（2）地理空间数据；（3）站点监测数据；（4）其他资料数据。

（1）勘察测定数据

通过实地勘察测定，直接获取目标点位现实状态数据。本指南中具体指：1）地质勘察数据，包括土壤剖面数据、包气带深度数据、初见水位深度等，用于模型初始条件的参数设置和目标土层轮廓描述，数据通过目标地块岩土工程勘察数据报告获得；2）土壤参数数据，包括土壤残余持水量、土壤饱和持水量、土壤粒径分布、土壤进气值（的倒数）、土壤饱和导水率等，用于模型水分运移参数输入，数据参照 GB/T 50123 测定或通过地块岩土工程勘察报告获得；3）污染物浓度数据，描述土壤中有机污染物原始浓度，用于模型的边界条件设置，根据场地实地采样实验室检测获得。

（2）地理空间数据

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。本指南中具体指用于描述模拟点位的坐标与地形地貌数据。对于地质勘察信息缺失的特定点位，可通过对区域空间内已勘察测定的数据进行插值推算。地理空间数据通过公开或非公开的地理空间信息数据集获取。

（3）站点监测数据

区域内观测站点中多种传感器记录的基于时刻的连续、长时间序列监测数据。本标准中主要指气象观测数据，描述观测站点所处地理位置气象状态的数据，用于模型气象参数设置。数据包括降水量、蒸腾量、太阳辐射数据、最高温、最低温、湿度、风速、日照时间等信息。数据通过已有的监测站点或基于特定的气象水文数据产品获取。

（4）其他资料数据

其他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，用于描述污染物物理性质以及化学性质的参数；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，包括与模型构建和边界条件相关的参数等，由相关文献资料获得，或使用 HYDRUS-1D 中默认参数。

6.4 数据预处理

根据数据现状与模型需求，对 6.3 获得的数据进行预处理，主要包括数据清洗、数据转换与格式化。其中，（1）数据清洗：处理数据的重复值、异常值和缺失值，即对重复值、异常值进行去重或删除，对缺失值使用默认值、平均值或上一时刻的正常值进行替换；（2）数据转换与格式化：标准中所使用的时间、空间、浓度等数据根据 HYDRUS-1D 模型需求进行转换。最终得到数据完备、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。本标准中使用 HYDRUS-1D 模型，需要对空间域与时间域进行离散化处理。

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，主要为垂直空间离散化。HYDRUS-1D 模型仅研究垂直方向溶质液体渗透运移的过程，模型不考虑水平空间内分布特征。垂直空间离散化如图 2 所示：

（1）针对每个点位单元建立以垂直向下为正方向的 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。

（2）对包气带进行细化，根据 HJ 25.2 中 6.2.1.1（4）的规定，0-0.5 m 表层土壤、0.5 m~6 m 间土壤土层划分间隔不超过 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。

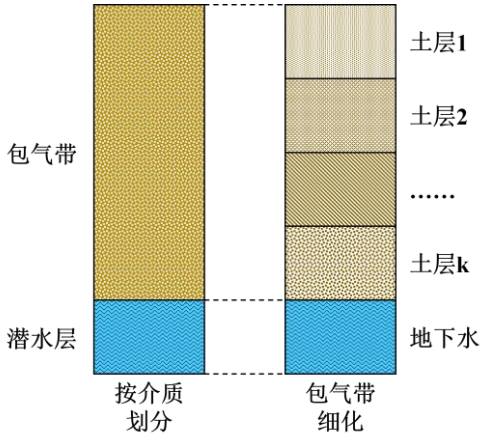

图 2 垂直空间离散化示意图

7.3 时间离散化

时间离散化用于确定 HYDRUS-1D 模型模拟时的迭代步长。

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。

选择 HYDRUS-1D 模型的合适时间步长，且满足:

$$\left|\frac{v_z dt_{\mathrm{HYDRUS-1D}}}{dz_{min}}\right| \leq 1$$

其中，$dt_{\mathrm{HYDRUS-1D}}$为 HYDRUS-1D 的模拟步长，v_z分别为溶质在 Z 轴的移动速率，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 有机污染物包气带运移模拟

8.1 一般规定

包气带污染物运移模拟基于 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。

8.2 参数设置

参数设置包括在 HYDRUS-1D 软件中对初始条件参数、水流参数、溶质运移参数、可变边界条件与气象信息，以及土壤剖面图形编辑等进行设置。

初始条件参数包括主过程、几何信息、时间信息和输出信息等设置面板。其中，主过程复选框选取“水流”与“溶质运移”；几何信息、时间信息和输出信息中参数根据 7.2 与 7.3 中处理方法进行设置。信息内相关参数（土壤质地数目、土柱倾斜角度、土柱深度等）获取方法可参考附录 A。

水流参数主要包括土壤残余持水量、土壤饱和持水量、饱和水力传导度、土壤水分特征曲线参数、导水函数中弯曲度等参数。相关参数获取方法可参考附录 A；此外，水流模型迭代准则参数根据 7.2 中空间离散化处理方法设置，水流边界条件根据场地实际情况进行设置。

溶质运移参数主要包括溶质运移模型选择、土壤容重、纵向弥散系数、无因次吸附位点分数、束缚含水量、自由水中扩散系数、空气中扩散系数、吸附等温系数、液相和气相平衡分布 Henry 常数等参数。相关参数获取方法参考附录 A；模型水流边界条件根据场地实际情况进行设置。

可变边界条件与气象信息主要包括模拟时间、污染物浓度、太阳辐射数据、最高温、最低温、湿度、风速、日照时间、作物高度、反射率、叶面积指数、根系深度、降水量、潜在蒸散量、潜在蒸腾率等。相关参数获取方法参考附录 A。

土壤剖面图形编辑根据 7.2 中空间离散化处理方法进行设置。

8.3 包气带污染物运移过程模拟

基于 7.2 空间离散化的结果，对目标点位使用 HYDRUS-1D 模型进行模拟，模拟输入的土壤剖面结构通过 7.2 中垂直空间离散方法获取。模拟时间步长由 7.3 中时间步长划分方法确定。

根据每个点位的土壤表层测量孔隙水中污染物浓度C_e（mg/L），模拟包气带下层（对应垂直空间离散化后最深网格）的污染物浓度达到动态平衡时的最大浓度，视为土壤平衡浓度C_d（mg/L）。

9 包气带衰减因子计算

基于 8.3 包气带污染物运移模拟，获得特定深度（包括土壤表层与包气带下层）随时间变化的溶质浓度，包气带垂直淋溶浓度衰减因子 *AF* 计算公式如下：

$$AF = \frac{C_{\mathrm{e}}}{C_{\mathrm{d}}}$$

式中，C_e 为土壤表层孔隙水中有机污染物的浓度（mg/kg）；C_d 为包气带下层土壤溶液中有机污染物的浓度（mg/kg）。

附录 A HYDRUS-1D 软件包气带污染物运移模拟输入参数及数据来源

参数	参数获取方法与来源
初始条件参数	
土壤质地数目	参照 GB/T 50123 测定或通过地块岩土工程勘察报告
土柱倾斜角度	
土柱深度	
水流参数	
水动力模型	根据场地土壤孔隙度，选择最适模型，常用的经验模型为 van Genuchten 模型（适用于质地较细的土壤（1.0＜n＜1.3），n 为土壤水分特征曲线参数）
土壤残余持水量（Q_r）	（1）参照 GB/T 50123 测定或通过地块岩土工程勘察报告； （2）根据 HYDRUS -1D 中 Neural Network prediction 内嵌的 Rosetta 模型预测
土壤饱和持水量（Q_s）	
饱和水力传导度（K_s）	
土壤水分特征曲线参数（Alpha）	（1）通过实验室或田间批量实验，非线性回归拟合 van Genuchten 方程[1, 2]； （2）根据 RETC、SWRC Fit 等专业软件，对 van Genuchten 方程进行参数拟合[3, 4]； （3）根据 HYDRUS -1D 中 Neural Network prediction 内嵌的 Rosetta 模型预测
土壤水分特征曲线参数（n）	
导水函数中弯曲度参数	（1）根据 RETC、SWRC Fit 等专业软件，对 van Genuchten 方差进行参数拟合[3, 4]； （2）推荐值为 0.5，适用于多数土壤（默认值）
水流边界条件	根据场地实际情况选择，推荐选择“定水头”和“自由排水”，初始条件种类选择“水头”
溶质运移参数及数据来源	
溶质运移模型	选择“平衡模型”
容重	参照 GB/T 50123 测定或通过地块岩土工程勘察报告获得
纵向弥散系数（Disp.）	（1）使用实验室批量实验获取[5]； （2）根据土壤质地，获得参数范围取值[6]
无因次吸附位点分数（Frac）	推荐值为 1.0
束缚含水量（Thlmob）	推荐值为 0
自由水中扩散系数	根据 PubChem、Springer Materials、NIST Chemistry WebBook 等化学数据库或文献收集获得
空气中扩散系数	
吸附等温系数 K_d	根据实验室批量实验的 Freundlich 模型拟合获得[7, 8, 9]
吸附等温线系数 Nu	根据实验室批量实验的 Langmuir 模型拟合获得[8, 9]
吸附等温线系数 β	根据实验室批量实验的 Freundlich 模型拟合获得[8, 9]

液相和气相平衡分布常数 Henry	（1）根据 PubChem、Springer Materials、NIST Chemistry WebBook 等相关数据库或文献收集获得； （2）对于非挥发有机物，推荐值为 0
溶质运移边界条件	根据场地实际情况选择，推荐溶质运移上边界选择“通量边界条件”，下边界为“零梯度边界”，初始条件选择“液相浓度”

可变边界条件与气象信息

模拟时间	根据场地实际情况获取，通常为 10 年或更长时间
污染物浓度	通过场地实地采样实验室检测获得
太阳辐射数据	通过气象水文数据产品获得
最高温	
最低温	
湿度	
风速	
日照时间	
作物高度	
反射率	
叶面积指数	
根系深度	
降水量	
潜在蒸散量	
潜在蒸腾率	

主要参考文献

[1] Genuchten V. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. Soil Science Society of America Journal, 1980, 44:892-898. DOI:10.2136/SSSAJ1980.03615995004400050002X.

[2] 张喜英, 张橹, 刘昌明. 太行山前平原土壤水分特征曲线拟合参数的确定[J]. 华北农学报, 2001, 16(2):8. DOI:CNKI:SUN:HBNB.0.2001-02-014.

[3] Genuchten V, Leij F J, and Yates S. R. The RETC Code for Quantifying the Hydraulic Functions of Unsaturated Soils. Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory, Office of Research and Development, U.S. Environmental Protection Agency, 1992.

[4] https://swrcfit.sourceforge.net/ [2025-04-15]

[5] Anthony E and Agunwamba J. Experimental Determination of Dispersion Coefficient in Soil. Emerging Science Journal. 2018, 2(4). DOI:10.28991/esj-2018-01145.

[6] Gelhar L W, Welty C, Rehfeldt K R. A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers[J].Water Resources Research, 1992, 28(7):1955–1974.DOI:10.1029/92WR00607

[7] 罗晓丽,齐亚超,张承东,等.多环芳烃在中国两种典型土壤中的吸附和解吸行为研究. 环境科学学报, 2008, 28(7):6.DOI:10.3321/j.issn:0253-2468.2008.07.019.;

[8] Site, D., & Alessandro. Factors affecting sorption of organic compounds in natural sorbent/water systems and sorption coefficients for selected pollutants. a review. Journal of Physical & Chemical Reference Data, 2001, 30(1), 187-439.

[9] Von Oepen, B., Kördel, W., & Klein, W. Sorption of nonpolar and polar compounds to soils: processes, measurements and experience with the applicability of the modified OECD-Guideline 106. Chemosphere, 1991, 22(3-4), 285-304.