

土壤中三卤甲烷前驱物质面源负荷估算模型^{*}

李适宇, 王 鹏, 杨秀虹, 仇荣亮
(中山大学环境科学与工程学院, 广东 广州 510275)

摘 要: 土壤中的三卤甲烷 (THMs) 前驱物质在降雨过程中产生对水体的面源污染负荷。建立了一个以三卤甲烷生成潜能 (THMFP) 为指标的面源污染负荷估算模型。模型由降雨—径流模型和污染物输出模型两部分组成, 用以实现对不同土壤条件、降雨条件下 THMFP 面源污染负荷的估算。

关键词: 三卤甲烷生成潜能 (THMFP); 土壤; 面源污染负荷; Horton 模型

中图分类号: X53 **文献标识码:** A **文章编号:** 0529-6579 (2003) 03-0069-04

大量的研究结果表明, 自来水厂出水中的致癌物质三卤甲烷 (THMs) 的形成是净水处理时作为消毒剂加入的氯与原水中的腐殖酸反应的结果^[1-8], 因此腐殖酸一直被认为是 THMs 的重要的前驱物质。因为腐殖酸是普遍存在于各种天然和受污染水体的有机物, 对 THMFP (THMs 生产潜力—在一定加氯反应条件下形成的 THMs 的量) 的研究引起了人们的重视^[6-8]。1988—1989 年在日本大阪地区所作的调查结果表明, 河流的 THMs 前驱物质负荷量与流域内的山林面积、农田面积成正比; 在中、上游地区, 山林与农田地表径流所含腐殖质占水源 THMs 前驱物质总量的 50%~70% (大阪府水道部. 微量有机物质发生源调查报告书. 1989 (日文)), 说明土壤腐殖质是水源 THMs 前驱物质的重要来源, 并随降雨产生的地表径流以面源污染负荷的形式进入水体。对不同类型土壤的腐殖质含量、组成及其流出机理已经有了一些基础性的研究^[9-11]。本文是在此基础上建立一个 THMFP 面源流出负荷模型。

由于我国还是发展中国家, 预料在相当长的一段时期内, 难以改变用氯消毒这一传统而经济有效的自来水处理方式, 所以, 控制和降低 THMs 的对策在很大程度上将通过选择合适的水源以及削减各种来源的前驱物质来实现。因此, 正确估算从面源进入水源的 THMFP 负荷量, 可为指导选择水源, 以及评价水污染治理的效果提供科学依据, 具有重要的现实意义。

1 建模的考虑与选择

由于面源污染负荷与降雨量、降雨强度、流域下渗和蓄水特征及其它水文参数有密切关系, 常常将面源污染作为一个特殊的水文问题来处理。因而, 大部分用来模拟面源污染负荷的模型, 都是基于流域水文模型, 并在此基础上再构建污染物输出模型。

本研究的模型由降雨径流子模型和污染物输出子模型两部分组成, 其中降雨径流子模型的下渗量计算使用 Horton 公式, 且由于 Horton 公式使用上的某些缺陷, 在使用过程中对其进行改进。污染物输出子模型用“富集系数法”计算由径流迁出的污染物的量。由于在单次降雨事件中, 蒸散量小, 且为简化计算过程, 模型忽略降雨过程及产流期间的蒸发量 (这可能不会超过允许的误差级^[12])。此外, 考虑到模型估算的是污染物的负荷量, 对出流时滞性研究要求不高, 因此在计算过程中, 对影响出流时间的一些因子适当地进行了简化, 如由于植物截留和填洼量小, 且对最终的产流总量影响不大, 因此, 计算过程中未予考虑。

2 降雨—径流模型

2.1 Horton 模型

Horton 方程^[13]是根据实验资料建立的下渗容量曲线经验公式, 它把下渗率简单地描述为随时间呈指数降低 (如图 1)。其公式如下:

* 收稿日期: 2002—08—12

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (49771071); 广东省自然科学基金资助项目 (970124); 教育部高等学校骨干教师资助计划项目

作者简介: 李适宇 (1956 年生), 男, 教授, 博士生导师; E-mail: eeslsy@zsu.edu.cn

$$f_p = f_c + (f_0 - f_c)e^{-\alpha t} \tag{1}$$

式中, f_p 为实际的下渗率 (mm/h); f_c 为饱和下渗率 (mm/h); f_0 为干燥土壤的初始下渗率 (mm/h); α 为土壤物理性质的参数, 其单位由公式确定; t 为下渗时间 (h)。其中 f_c 、 f_0 、 α 可查阅文献或通过实验确定。

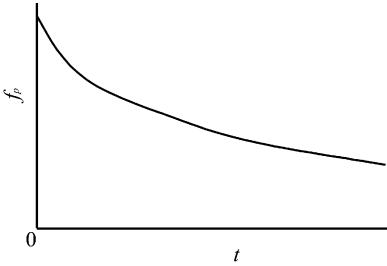


图 1 Horton 模型下渗曲线

Fig 1 The infiltration curve of Horton model

Horton 公式概念明确, 有实验根据, 扣损方便。但也存在问题^[14-16], 主要是降雨过程中雨强小于下渗率时, 不能直接应用 Horton 模型进行计算。另外, 该公式未考虑不同初始土壤含水量。

2.2 对 Horton 模型的一些改进处理

2.2.1 确定不同雨强对下渗的影响 据“超渗产流”的基本概念^[14-16, 18, 19], 即判别降雨是否产流的标准为雨强 (i) 是否超过下渗率 (f)。而实际的下渗率

$$f(t) = \min[f_p(t), i(t)] \tag{2}$$

典型的 f_0 和 f_c 常常大于雨强值, 但利用 Horton 公式计算, 即使雨强非常小, f_p 也会逐渐减小, 因为 f_p 只是时间函数, 这就导致不论进入土壤的水量有多少, 下渗能力都会不断减小。因此, 为了弥补这一缺陷, 模型中采用 Horton 公式的积分式:

$$F_p = \int_0^{t_p} f_p dt = f_c t_p + \frac{f_0 - f_c}{\alpha} (1 - e^{-\alpha t_p}) \tag{3}$$

实际累积下渗量:

$$F_p = \int_0^t f(t) dt = \int_0^t \min[f_p(t), i(t)] dt \tag{4}$$

t_p 可由方程 (3) 和 (4) 联立确定。这样就确定了实际下渗量对应 Horton 公式上的时间 (注意 $t_p \leq t$)。通过以上处理 f_p 将是实际累积下渗量的函数, 而不仅仅是时间的函数。

2.2.2 确定土壤前期含水量对计算的影响 土壤前期含水量的变化, 是影响降雨过程径流量的一个

重要因素。本模型选用指标法, 即前期影响雨量 (P_a) 法^[17-21]。即根据土壤前期含水量 P_a , 推导 Horton 方程中的开始计算的时间 t_0 。

(1) 前期含水量 P_a 的确定 土壤 P_a 为土壤湿度的指标, 可以实测也可以根据前期雨量, 应用下式计算求得。

$$P_{a,i} = KP_{i-1} + K^2 P_{i-2} + \dots + K^{15} P_{i-15} \tag{5}$$

式中, $P_{a,i}$ 为日开始土壤含水量; P_{i-1} 为前 1 天的日雨量; P_{i-2} 为前 2 天的日雨量; P_{i-15} 为前 15 天的日雨量; K 为雨量形成土壤含水量的日折减率。

上式的含义是土壤含水量 P_a 由前期雨量形成。降雨经过 1 天, 剩下部分为土壤含水量。部分为蒸发量; 一直到 15 天, 期间各日降雨经过蒸发剩余的土壤含水量总和为 i 天的 $P_{a,i}$ 。

为便于递推计算, 将式 (5) 变换如下:

$$P_{a,i+1} = KP_i + K^2 P_{i-1} + \dots + K^{15} P_{i-14} = K(P_i + KP_{i-1} + \dots + K^{14} P_{i-14}) = K(P_i + P_{a,i}) \tag{6}$$

这样就可求得土壤前期含水量。

(2) 初始下渗率的确定 根据土壤 P_a , 在 Horton 曲线上找到降雨开始时刻 t_0 (图 2)。

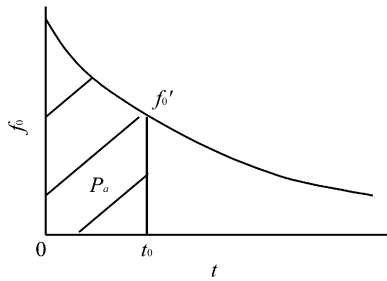


图 2 土壤前期土壤含水量对应 Horton 曲线上的时刻曲线

Fig 2 Time and infiltration rate corresponding to initial water content of soil

$$P_a = \int_0^{t_0} f_p dt = \int_0^{t_0} [f_c + (f_0 - f_c)e^{-\alpha t}] dt = f_c t_0 + \frac{1}{\alpha} (f_0 - f_c) (1 - e^{-\alpha t_0}) \tag{7}$$

式中, P_a , f_0 , f_c , α 已知, 通过迭代计算, 即可求得 t_0 时的数值解。实际下渗便从 t_0 时刻开始, 如图 2 所示。此时的下渗率为 f_0'

$$f_0' = f_c + (f_0 - f_c)e^{-\alpha t_0} \tag{8}$$

通过上面处理, 使用 Horton 方程时, 就可以区分不同的土壤初始含水量。

3 污染物输出模型

考虑到本研究的前期工作中已确定广东省各土壤 THMFP 背景值的情况下^[9-11, 22, 23], 为了描述不同土壤类型 THMFP 污染物迁出与径流量的关系, 利用富集系数的概念, 建立污染物输出模型。即利用母土中污染物本底浓度 c_s , 与富集因子 ER 的乘积来计算地表径流中的污染的浓度 c 。

$$c = c_s \cdot ER \tag{9}$$

采集广东省各类典型土壤, 实验室测定 THMFP 的背景值含量^[22, 23]。选取典型小径流场采集、实验室测定降雨过程中农田与山林地表径流中的 THMFP 的浓度, 确定地表径流对 THMFP 的富集系数^[24]。其计算公式如下:

$$\bar{c} = \frac{\sum_{i=1}^{i=n} (c_i \times V_i)}{\sum_{i=1}^{i=n} V_i} \tag{10}$$
$$ER = \bar{c} / c_0 \tag{11}$$

其中, ER 为径流对 THMFP 的富集系数; $\bar{c}$ 为整个降雨过程中的 THMFP 的平均浓度; c_i 为第 i 个采样时段所采集样品的 THMFP 浓度; c_0 为土壤溶液 THMFP 的背景浓度; V_i 为第 i 个采样时段产流量; n 为样品个数。

在使用该方法的时候, 富集系数会随着土壤污染物背景值测定方法的不同而不同。所以要特别注意使用的条件。

4 模型验证

本研究选取位于广东省鹤山市马山境内的中国科学院鹤山丘陵地带综合试验站内的一个全封闭的径流试验场进行水量、水质同步观测。该试验场集雨面积 8 250 m², 坡面平缓, 坡度为 18°~30°, 土壤为赤红壤, 植被以马占相思林为主, 占 80% 以上, 其余为草坡。在实验场共取得 3 次降雨径流配套数据。对降雨—径流模型进行验证。其结果如图 3 所示。

对以上 3 场不同历时、不同强度的降雨进行计算, 结果满足误差要求, 而且降雨强度越大, 计算精度越好。这是因为本模型是估算污染物的负荷量, 因此对影响出流的时滞性的许多因素未予考虑, 因此对降雨强度较小, 即影响出流时滞性的因素作用较突出的降雨 (如第 1 场降雨), 在估算时会出实测值有些偏差, 对雨强较大的降水 (第 3 场降雨), 其模拟精度会好一些。

对 2000 年 4 月 7 日的一场降雨过程进行降雨、

径流、水质全过程监测。监测数据和实验结果图 4 所示。经计算富集系数 ER=0.65。

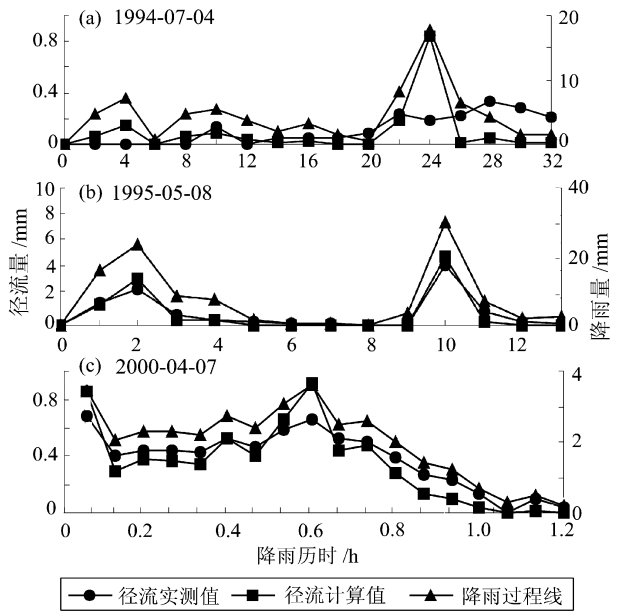


图3 降雨径流计算值与实测值的比较

Fig 3 Comparison of simulated and surveyed runoff process

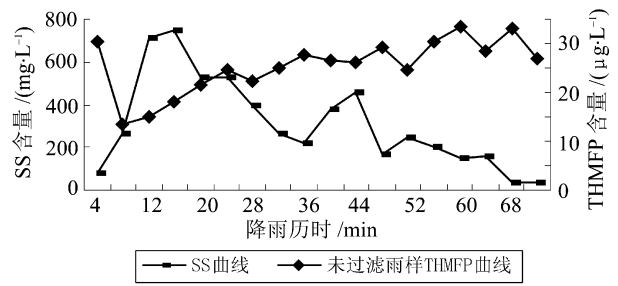


图4 2000年4月7日降雨地表径流中THMFP含量

Fig 4 THMFP concentration during the runoff process (April 7, 2000)

5 讨论与结论

本模型土壤前期含水量的确定公式, 为模型连续计算提供了可能性。在非降雨时段, 用公式 (5) 计算土壤的含水量 P_a , 降雨时段使用 P_a 作为初始土壤湿度, 计算下渗与产流量。即可实现连续计算。在估算某个区域的某年或某月长期 THMFP 面源污染物负荷时, 需要使用模型进行连续计算。

污染物输出模型采用“富集系数法”, 只要能确定降雨径流对其它污染物的富集系数, 即把本模型于应用于其它面源污染物负荷的估算场合。鉴于模型的弹性大, 因而适用的地区就可能比较广泛。如能在应用于中不断改善模型结构, 探讨模型参数的地区分布规律, 则可以为在资料短缺的条件下应用模型提供基础。

参考文献:

[1] ROCK J J. Fomation of haloforms during chlorination of natural watef [J] . Water Treatment & Examination, 1974, 23 (2): 234— 246.

[2] 黄君礼,寇广中,杨滨生. 水中腐殖酸等前驱物质对卤仿形成的影响 [J] . 环境化学, 1987, 6(5): 14— 22.

[3] 王永华,袁伟,舒宏新. 饮水中的挥发性卤代烃的研究 [J] . 环境科学学报, 1994, 14(2): 244— 250.

[4] 王玉芹,译. 有机卤化物在环境中的存在及转化规律 [J] . 国外环境科学技术, 1995(4): 5— 9.

[5] 李建渠,李灵芝. 饮用水中卤化消毒副产物的产生和影响因素的研究[J] . 重庆环境科学, 1998, 20(3): 55— 57.

[6] 潘文芳,张大年,前田,等. 腐植酸氯化过程中氯仿生成的基础研究[J] . 环境科学, 1996, 17(6): 31— 36.

[7] 王岐硝. 腐植酸形成氯仿的预测模式[J] . 国外环境科学技术, 1995, 34— 40.

[8] 黄君礼,霍范菊,王学风,等. 饮用水氯化中 THMFP 的预测模式研究[J] . 环境科学进展, 1995, 3(5):

[9] 李适宇,仇荣亮,杨秀虹,等. 华南地区土壤中不同结合态腐殖质的三卤甲烷生成潜能[J] . 环境科学, 2000, 21 (4): 38— 41.

[10] 李适宇,仇荣亮,杨秀虹,等. 广东省主要土类的三卤甲烷生成潜能(THMFP)[J] . 环境科学, 2001, 22(4): 60 — 66.

[11] 杨秀虹,李适宇,仇荣亮,等. 土壤中三卤甲烷(THMs)前驱物质流出的研究[J] . 环境科学, 2002, 23(1): 108 — 113.

[12] 周国逸. 生态系统水热原理及其应用[M] . 北京: 气象出版社, 1997.

[13] HORTON R E. An approach tow and a physical interpretation of infiltration capacity[J] . Soil Sci Am J, 1940(5): 399— 417.

[14] 赵人俊. 流域水文模拟[M] . 北京: 水利水电出版社, 1984.

[15] 于维忠. 论流域产流[J] . 水利学报, 1985(2): 1— 11.

[16] 芮孝芳. 产汇流理论[M] . 北京: 水利水电出版社, 1995.

[17] 芮孝芳. 径流形成原理[M] . 河海大学出版社, 1991.

[18] 张沥,胡彩虹. 蓄满—超渗兼容的耦合产流模型与基本产流模型的比较分析[J] . 河北水利, 1999, 2.

[19] 郑国权. 华南地区城市雨洪模型的探讨分析(以深圳市罗湖小区为例)[D] . 广州: 中山大学, 1999.

[20] 长江流域规划办公室. 水文预报方法[M] . 北京: 水利水电出版社, 1979.

[21] 水利电力部南京水文水资源研究所. 水文水资源论文选[C] . 北京: 水利电力出版社, 1986.

[22] 杨秀虹. 土壤中 THMFP 流出机理研究(以广东省为例)[D] . 广州: 中山大学, 2000.

[23] 王鹏. 广东省土壤中 THMFP 面源污染负荷估算模型研究[D] . 广州: 中山大学, 2000.

Modeling the Runoff of Trihalomethane Precursors from Soil

LI Shi-yu, WANG Peng, YANG Xiu-hong, QIU Rong-liang

(School of Environmental Science and Engineering, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China)

Abstract: Trihalomethane formation potential (THMFP) is an indicator of the content of trihalomethane precursors in environmental media. The THMFP in soil contributes a large part to the pollution of water body in the fom of non-point source pollution due to surface runoff. A non-point source THMFP model is proposed to simulate the runoff of THMFP load under various rainfall and soil conditions. The model consists of two parts. One is the rainfall-runoff sub-model based on the modified Horton model in which the initial water content of soil is taken into account. The other part is the pollutant output model that employs the method of accumulative coefficient determined from field data. The model is verified with field survey data and the results are discussed.

Key words: trihalomethane fomation potential (THMFP); soil; non-point pollution load; Horton Model