

农田气象条件下阿特拉津在土壤中 淋溶动态的数值模拟*

毛 萌^{1,2} 任 理^{1,†}

(1 中国农业大学土壤和水科学系, 北京 100094)

(2 教育部植物-土壤相互作用重点实验室, 北京 100094)

摘 要 阿特拉津(Atrazine)是我国华北地区夏玉米田常用的除草剂, 而夏玉米生育期又是该地区的主要降雨时段, 对这一时段 Atrazine 在田间尺度的淋溶风险进行评价, 对保护浅层地下水环境具有重要意义。以北京市通州区永乐店试验站一块 27 m × 27 m 的农田为背景, 通过田间采样、测试分析土壤样品并收集 2001 年的气象数据, 基于简化土壤水三维流场的柱模型假设, 在同时考虑土壤水力学参数、Atrazine 运移和吸附参数空间变异性的情况下, 对该农药在农田尺度下淋溶动态的空间分布进行了数值模拟。在此基础上, 对夏玉米不同生育期耕层 20 cm 深度处的土壤水负压、水流通量和 Atrazine 浓度的空间变异结构进行了地质统计学分析。结果表明, 在整个夏玉米生育期内这三个参量的半方差模型基本上为球状模型, 它们的变程多在 8~10 m。本研究案例对布设农田尺度土壤水分和 Atrazine 动态监控网具有一定的参考意义。

关键词 土壤; 阿特拉津; 农田尺度; 淋溶; 数值模拟; 地质统计学

中图分类号 S152

文献标识码 A

土壤的空间变异性是土壤的各种成土因子在一定的空间和时间尺度范围内作用和相互作用的产物^[1]。无论是监测和模拟农田生态系统中的农药运移和转化规律, 还是选择合适的土壤污染修复方法, 对影响农药运移和转化的土壤空间变异特性的研究, 都是十分重要的。土壤这种多孔介质本质上所具有的非均质和各向异性, 对精确模拟农药在其中的淋溶行为从物理上构成了研究的瓶颈和障碍, 但也成为相关研究领域富有挑战性的科学问题。基于对土壤空间变异性在影响农田生态环境和土地利用方面重要性的认识, 特别是大尺度土壤溶质运移的模拟必须将描述动力学过程的机理模型与刻画空间变异的地质统计学理论相结合, 近年来很多学者对农田土壤的物理、化学和生物特性的空间结构信息开展了定量化研究^[1~4]。然而, 在研究溶质运移方面的文献中, 考虑的空间变异参数多为土壤的饱和水力传导度^[5~8], 也有少量关于吸附参数空间变异的探讨^[9, 10], 但尚少涉及土壤非饱和水力传导度和溶质运移弥散度的空间变异性, 特别是将土壤水力学参数、农药运移和吸附参数的空间变异特征一并

考虑, 运用土壤水动力学和土壤溶质运移数值模型, 分析农药在农田尺度下淋溶动态的空间分布, 在国外尚不多见。毛萌和任理^[11]在同时考虑土壤水力学参数、溶质运移和吸附参数空间变异的情况下, 就所设计的降雨-入渗重分布条件, 对农药阿特拉津(Atrazine)在农田尺度土壤中的淋溶风险进行了数值预报, 这是迄今为止国内在这方面研究的首次报道。

与文献[11]不同, 本文的研究目标侧重考虑农田自然气象条件对夏玉米生育期 Atrazine 在土壤中运移动态的影响, 仍以北京东郊永乐店节水农业试验站的农田为研究对象, 将具有空间变异特性的土壤水力学参数、Atrazine 运移和吸附参数作为模型的输入参数, 应用描述土壤水分运动和 Atrazine 运移的确定性数值模型, 对该农药在土壤中淋溶行为的空间分布动态进行数值模拟, 并对主要的数值模拟结果进行地质统计学分析。本文之目的在于为建立田间监控网而联合运用数值模拟理论和地质统计学方法来探明田间尺度 Atrazine 高淋失风险点位提供一个可资借鉴的工作模式, 此外, 为应用数值预报手

* 国家自然科学基金项目(编号: 40271058)资助

† 通讯作者

作者简介: 毛 萌(1977~), 女, 青岛人, 博士, 讲师, 主要研究方向: 土壤物理与水环境的数学模拟

收稿日期: 2005-07-14; 收到修改稿日期: 2006-01-26

段估算 Atrazine 通过农田土壤耕层的淋失动态提供一个研究案例。

1 材料与方法

1.1 田间采样

北京市水利科学研究所永乐店试验站的基本情况和田间模拟小区的采样点布设(文献[11]的图1)以及样品的采集和分析方法详见文献[11],在此不再赘述。

1.2 数值模型

基于柱模型假设来构造一维数学模型。对于水流问题,考虑作物的根系吸水和土面蒸发作用,忽略非饱和土壤水力特性的滞后影响;对于 Atrazine 的淋失,在溶质运移的控制方程中既考虑水动力弥散和分子扩散又考虑线性平衡吸附和一阶降解动力学过程。

数学模型中控制土壤垂直一维水分运动的 Richards 方程为^[12]:

$$C(h) \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h) \frac{\partial h}{\partial z} \right] + \frac{\partial K(h)}{\partial z} - S \quad (1)$$

式中, h 为压力头[L]; $C(h) = d\theta/dh$ 为比水容量[L⁻¹], 其中的 θ 为体积含水量[L³L⁻³]; t 为时间[T]; z 为土壤深度[L], 将坐标原点定在地表, 取向上为正; $K(h)$ 为水力传导度[L T⁻¹]; S 为汇项[T⁻¹], 此处指根系吸水。

Atrazine 运移的控制方程为:

$$\frac{\partial(R\theta c)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\theta D \frac{\partial c}{\partial z} \right) - \frac{\partial(v\theta c)}{\partial z} - \mu \theta c \quad (2)$$

式中, c 为液相中的溶质浓度[M L⁻³]; R 为阻滞因子, $R = 1 + \rho_b K_d / \theta$, 其中 ρ_b 为土壤干容重[M L⁻³], K_d 为线性吸附系数[L³ M⁻¹]; D 为水动力弥散系数, 是机械弥散和分子扩散之和[L² T⁻¹]; v 为平均孔隙水速度[L T⁻¹], μ 为一阶降解速率常数[T⁻¹].

对于水分运动的控制方程(1)和溶质运移的控制方程(2), 在对夏玉米生长条件下模拟小区内各不同测点所代表的土壤剖面进行水分运动和 Atrazine 运移动态模拟时, 根据实际背景考虑其定解条件。

1.2.1 初始条件的确定 对于土壤水分初始剖面, 考虑到夏玉米在播种前要浇足底墒水, 因为适宜的土壤水分不但能保证玉米适时播种出全苗, 也为幼苗茁壮生长创造条件^[13]。据文献[14], 玉米播种最适宜的土壤含水量为 17%~19%, 若含水量小于 13%, 种子不能发芽, 若含水量大于 19%, 出苗率又

降低。故对于永乐店试验站模拟小区, 由于播种后立即灌水施肥, 我们取其初始剖面为田间持水量的 70%, 而田间持水量可取为饱和含水量的 50%^[15]。对于 Atrazine 在土壤中的初始剖面, 同文献[11]中 1.3 节的考虑, 取其初值为零。

1.2.2 边界条件的确定 根据永乐店试验站提供的 2001 年 6 月至 9 月的气象观测资料, 该试验站整个夏玉米生育期内降雨量为 251.1 mm, 最大降雨量为 97.4 mm(2001 年 7 月 21 日)。由陈玉民等的研究, 我国华北地区夏玉米的多年平均需水量在 350~400 mm 之间^[16], 故对所研究的夏玉米生长期内的农田需要进行灌溉。夏玉米在不同生育期的需水量有很大的不同, 这在很大程度上取决于叶面积的大小和气温的高低, 河北农业大学和中国农业科学院农田灌溉研究所在高产水平下对 1990 年至 1991 年夏玉米不同生育期需水状况的研究指出: 拔节到抽雄这段时间需水量最大^[17]。此外, 浇足底墒水对玉米产量起决定作用, 因此, 模拟时选择在 6 月 15 日(播种)和 7 月 15 日(拔节)分别灌溉 75 mm 的水。

由于降雨、灌溉、作物蒸腾、土壤蒸发作用, 所以整个夏玉米生育期内土壤水分运动的上边界是动态的, 考虑到当降雨速率或灌溉速率(这里为 75 mm d⁻¹)大于模拟小区某些采样点土壤剖面的饱和导水率时, 例如模拟小区内有 11 个采样点(即: 3、11、19、20、57、69、87、88、90、97 和 100 号点)的饱和导水率小于最大降雨速率(97.4 mm d⁻¹), 则这些点位处的土壤表面会产生积水。故在数值模拟时, 选择了依赖于时间变化的边界条件, 具体地, 选择了具有表面层的大气边界(Atmospheric boundary condition with surface layer)。

对于 Atrazine 运移的上边界, 选择 Cauchy 条件, 即溶质通量边界。由于 Atrazine 单用量的有效成分通常不超过 1.5 kg hm⁻²^[18], 于是, 对于本文的研究区域, Atrazine 的最大用量约为 135 g。假设第一天灌溉后 Atrazine 立即被水溶解并入渗进入非饱和带土壤, 灌溉水中的 Atrazine 浓度为 2 mg L⁻¹(Atrazine 的最大用药量/模拟小区的灌水量), 即 Atrazine 被脉冲输入了 1 d; 此后, Atrazine 的输入浓度为零, 其溶质通量亦为零。

在整个模拟过程中, 根据永乐店试验站地下水埋深的监测情况, 确定了土壤剖面中的下边界深度。永乐店模拟小区在 2001 年夏玉米生育期内的最小和最大的地下水埋深分别为 7.7 m 和 10.63 m, 故将模拟区域的下边界定在土壤剖面深度 250 cm 处, 水

分运动和溶质运移的下边界条件分别取为自由排水边界和零浓度梯度边界。

上述定解条件的数学表达如下:

$$\begin{cases} h(z, 0) = h_i, z \leq 0, t = 0 \\ -K \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) = q_0(0, t) - \frac{dh}{dt}, z = 0, t > 0 \\ \left(\frac{\partial h}{\partial z} \right)_{z=-L} = 0, t > 0 \end{cases} \quad (3)$$

$$\begin{cases} c(z, 0) = 0, z \leq 0, t = 0 \\ -\theta \frac{\partial c}{\partial z} + qc = q_0(0, t) c_0(0, t), z = 0, t > 0 \\ \left(\frac{\partial c}{\partial z} \right)_{z=-L} = 0, t > 0 \end{cases} \quad (4)$$

其中, h_i 为初始剖面负压, 取为田间持水量的 70% 的土壤体积含水量所对应的土壤水基质势 (cm); L 为下边界的深度 (cm); $q_0(0, t)$ 为净入渗速率 (cm d^{-1}), 即降雨、灌溉和蒸发之差; $c_0(0, t)$ 为所施加的 Atrazine 浓度 (mg L^{-1})。

1.2.3 模拟时段的确定 根据许迪等^[19] 对北京大兴和河北雄县实验区夏玉米的生长期和生育阶段的研究, 播种、出苗、拔节、抽穗、灌浆和收获分别在 6 月 15 日、6 月 20 日、7 月 15 日、8 月 8 日、8 月 30 日和 10 月 1 日, 选定永乐店试验站模拟小区的夏玉米生长期为 109 d。

1.2.4 数值方法的选择 采用由美国农业部盐渍土实验室研制的 HYDRUS-1D 软件^[12], 对所构造的定解问题进行数值模拟。水分运动和溶质运移控制方程中的时间导数项和空间导数项分别采用 Crank-Nicholson 差分格式和 Galerkin 线性有限元方法。

1.3 模型参数的求取

对于土壤水力特性参数以及 Atrazine 的运移、吸附与降解参数的估算, 采用与文献^[11] 中 1.4 节相同的方法。需要注意的是, 由于田间土壤中残留的农药, 一般情况下主要残留于 0~15 cm 的耕层或 0~15 cm 的表层土壤中, 30 cm 以下土层中的残留量较少^[20], 对玉米的田间试验也表明, 土壤 30 cm 以下没有发现可计量 (检测限为 $50 \mu\text{g L}^{-1}$) 的 Atrazine 残留^[21], 所以, 在本文中 Atrazine 的运移距离近似取为

30 cm。

对于根系吸水模型, 采用 Feddes 等提出的公式, 模型参数是利用 HYDRUS-1D 软件中的根系吸水参数界面所提供的数据库直接生成的。由于根系对 Atrazine 的吸收是有限的^[21], 故忽略根系对农药的吸收且不考虑 Atrazine 对水分的胁迫作用。采用 Verhulst Pearl Logistic 生长方程模拟根系生长。根系生长因子的计算是基于如下假设^[12]: 在生长季的中点, 根的深度达到最大扎根深度的 50%。由于玉米的根系主要集中在土壤 0~40 cm 的深度, 占整个根量的 95% 左右, 玉米吸收养分和水分主要依靠这部分根^[13], 据赵秉强等^[21] 的田间试验研究, 玉米的最大扎根深度可达 160 cm, 但 99% 以上的根量集中在 120 cm 土层以上。所以在模拟时将最大扎根深度取为 120 cm。

对于模型中要求输入的潜在蒸发与潜在蒸腾量, 首先由 Penmar-Monteith 公式计算了参考作物的蒸散量, 接着将它乘以作物系数 (K_c) 计算出潜在作物蒸散量 (ET_p), 然后由叶面积指数 (LAI) 确定出潜在土壤蒸发量 (E_p) 并进而获得潜在作物蒸腾量 (T_p)。根据陈玉民等^[16] 对夏玉米生长期作物系数逐月变化的研究, 得知北京地区夏玉米全生育期的作物系数为 1.050, 由此, 我们确定了对应于 6、7、8 和 9 月的 K_c 值分别为 0.77、1.02、1.29 和 1.20。对于潜在土壤蒸发量, 据 LAI 由如下公式来确定^[23]:

$$\begin{cases} E_p = ET_p \times (1 - 0.43 \times LAI) & LAI \leq 1.0 \\ E_p = ET_p \times e^{-0.43 \times LAI} / 1.1 & LAI > 1.0 \end{cases} \quad (5)$$

而潜在作物蒸腾量则由下式获得:

$$T_p = ET_p - E_p \quad (6)$$

上式中的 LAI 是根据虎胆⁽¹⁾ 在永乐店试验站无覆盖条件下所测的夏玉米的 LAI 资料 (表 1) 进行取值的; 由于表 1 中仅有 7 个观测日的数据, 故对于从出苗到 7 月 1 日之间和 8 月 25 日到收获期间以及各观测日之间每天的叶面积指数, 通过简单的线性插值来计算。需要注意的是, 据林忠辉等^[24] 对夏玉米叶面积指数增长的研究, 对于收获时的叶面积指数, 取为最大叶面积指数的 1/2。

表 1 用于永乐店试验站夏玉米生育期内的叶面积指数

Table 1 Leaf area index (LAI) of summer maize during its growing season used in the Yongledian Experimental Station

观测日期 Observation date (mm dd)	07-01	07-10	07-25	08-03	08-12	08-18	08-25
叶面积指数 LAI	0.03	0.21	1.12	2.38	3.08	3.67	3.97

(1) 虎胆·吐马尔拜. 作物在秸秆覆盖条件下土壤水分运动的实验分析与数值模拟. 武汉水利电力大学博士学位论文, 1996

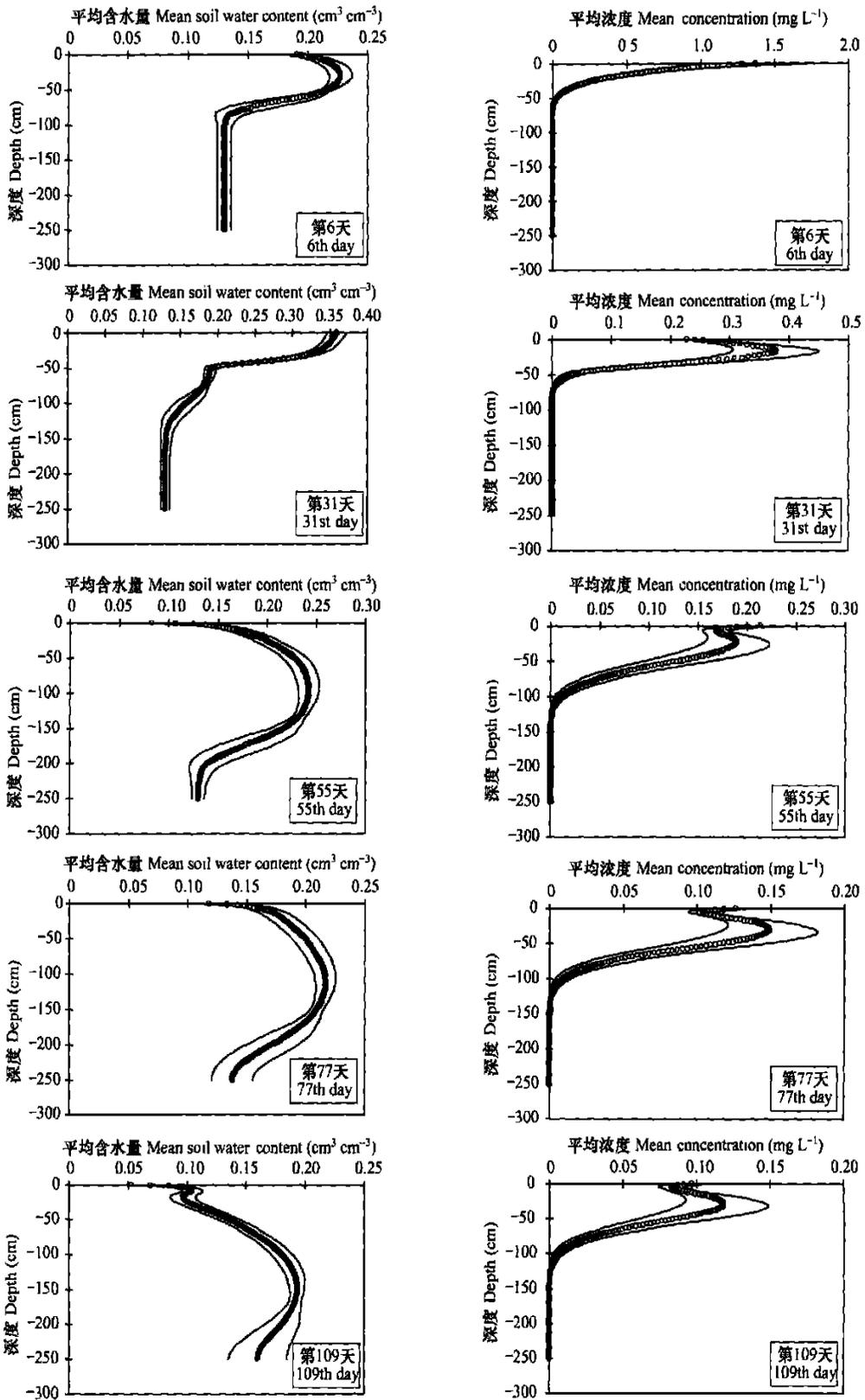


图1 模拟小区各模拟时刻的土壤平均含水量和 Atrazine 平均浓度及 ±1 个标准方差的分布情况

Fig 1 Distribution of mean soil moisture contents, mean atrazine concentrations and standard deviation of the 100 simulations of the study plot at different times

2 结果分析

2.1 数值模拟结果与分析

数值模型的模拟总时段为 109 d, 根据该站夏玉米不同的生育期, 对第 6 天(出苗)、第 31 天(拔节)、第 55 天(抽穗)、第 77 天(灌浆)和第 109 天(收获)的模拟结果进行分析如下:

由图 1 可见, 对于土壤含水量剖面, 在第 6 天, 模拟小区内播种后的灌溉水大约平均运动到土壤剖面 100 cm 深度处; 在第 31 天, 由于刚刚进行了灌溉, 所以深度在 100 cm 以上的土壤剖面比较湿润; 虽然第 37 天和第 66 天时, 发生了两场较大的降雨, 但在第 55、77 和 109 天时, 土壤表层仍较干燥, 且随着时间的推移, 土壤剖面较湿润的深度段由 50~100 cm 逐渐下移。而剖面中 Atrazine 浓度的最大处由土壤表面逐渐向下推移, 但始终未超出土壤 30 cm 深度, 且相应于这几个模拟时刻各土壤剖面 Atrazine 平均浓度的最大深度处也是模拟小区内该农药浓度方差的最大变化处。

如表 2 所示, 选择了具有代表性的两个土壤深度来探讨不同模拟时刻的水流通量和溶质通量: 20 cm(耕层底部)和 100 cm(根系主要活动带底部)。在 20 cm 深度处, 所有输出时刻中, 只有第 31 天时, 土壤水分向下运动, 这是由这一天的灌溉所造成的; 在收获时, 20 cm 以上的土体已经非常干燥, 水流通量基本上为零。参考图 1 可见, 在 100 cm 深度处, 出苗时由于绝大部分采样点所处的土壤剖面中水分运动的湿润锋还未到达此处, 仅有少数采样点所处剖面的水分移动到此, 从而导致在模拟小区该深度处的土壤水流通量变异极大; 第 6 天和第 31 天的土壤水流通量的最大值在该深度处均为零, 表明: 第 31 天时, 在模拟小区内仍有土壤剖面中的水流未达到 100 cm 深度处; 在第 77 天时, 模拟小区内各采样点所在的土壤剖面在此深度处的水分既有向下的运动也有向上的运动(12、28 和 39 号点)。当模拟时刻达到第 109 天时, 在土壤剖面 100 cm 深度处的水流全部向上运动, 而玉米主要根系也恰在该深度之上, 故土壤水分可补给夏玉米的根系吸收。这是因为在夏玉米生育后期, 随着土体上部的土壤含水量逐渐

表 2 模拟小区土壤剖面 20 cm 和 100 cm 深度处的水流通量(cm d^{-1})和溶质通量($\text{mg cm}^{-2}\text{d}^{-1}$)

Table 2 Soil water flux (cm d^{-1}) and solute flux ($\text{mg cm}^{-2}\text{d}^{-1}$) at the depths of 20 cm and 100 cm in the study plot

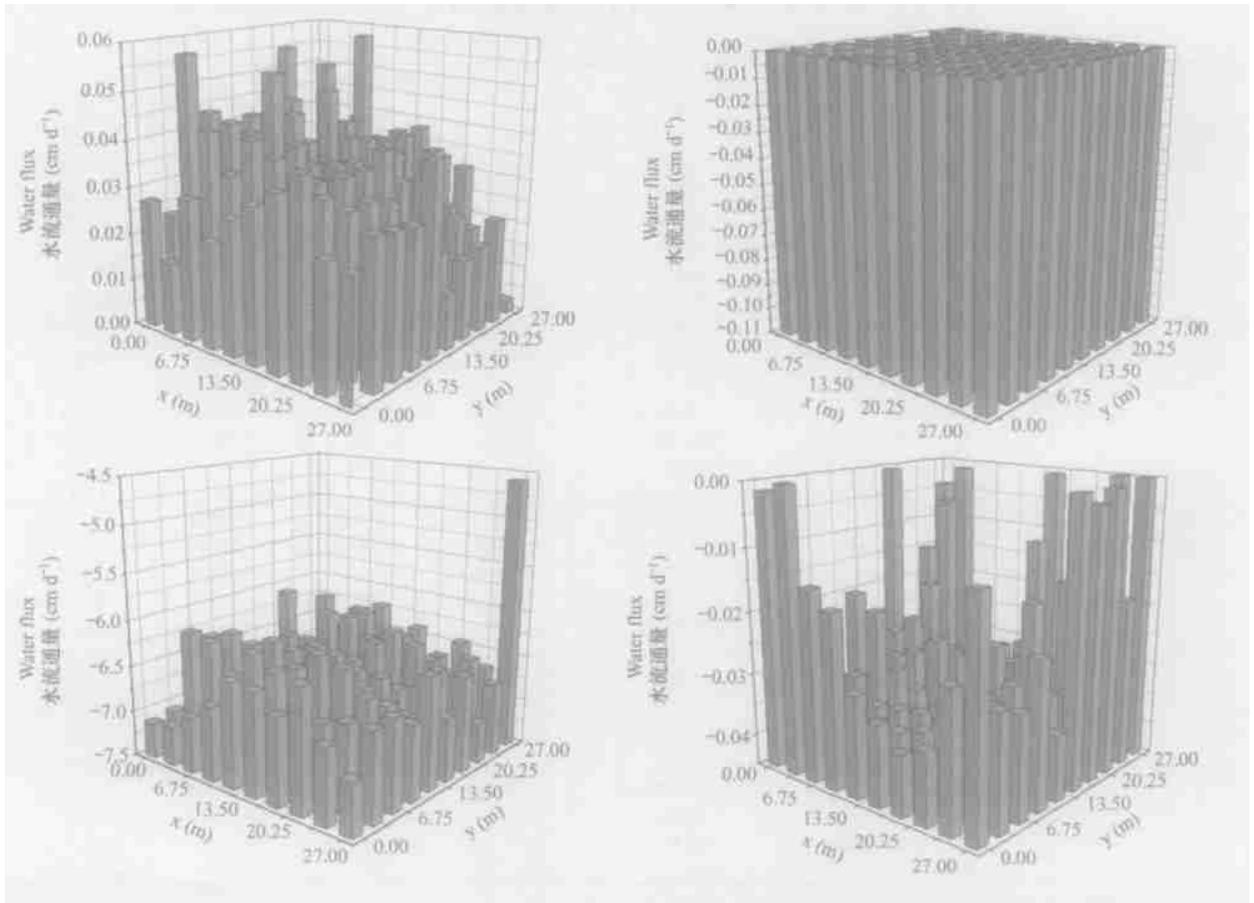
参量 Parameter	统计特性 Statistical characteristics	时间 Time					
		6 d	31 d	55 d	77 d	109 d	
水流通量 Water flux	20 cm	均值 Mean	0.032 8	- 6.53	0.088 9	0.031 5	0.000 5
		最小值 Minimum	0.002 7	- 7.50	0.033 2	0.013 7	0.000 0
		最大值 Maximum	0.058 4	- 4.58	0.137	0.051 3	0.000 9
		标准差 SD	0.009 6	0.353	0.021 9	0.007 5	0.000 2
		变异系数 CV	0.293	- 0.054 1	0.247	0.240	0.431
		偏斜系数 Skewness	0.028 7	1.39	0.063 1	0.374	- 0.156
		峰态系数 Kurtosis	0.987	8.48	- 0.531	- 0.153	- 0.443
	100 cm	均值 Mean	- 0.003 2	- 0.025 8	- 0.082 7	- 0.012 8	0.017 5
		最小值 Minimum	- 0.106	- 0.043 6	- 0.103	- 0.022 5	0.005 5
		最大值 Maximum	0	0	- 0.050 3	0.009 2	0.036 6
		标准差 SD	0.013 1	0.011 2	0.009 8	0.005 0	0.005 2
		变异系数 CV	- 4.113	- 0.435	- 0.119	- 0.389	0.298
		偏斜系数 Skewness	- 5.93	1.25	0.753	1.44	0.897
		峰态系数 Kurtosis	40.4	0.388	0.999	3.56	1.93
溶质通量 Solute flux	20 cm	均值 Mean	1.25E-05	- 2.42E-03	1.63E-05	4.29E-06	5.11E-08
		最小值 Minimum	7.59E-07	- 4.35E-03	8.03E-06	2.25E-06	8.77E-10
		最大值 Maximum	2.67E-05	- 1.20E-03	2.42E-05	6.82E-06	9.44E-08
		标准差 SD	4.74E-06	5.37E-04	3.25E-06	8.96E-07	2.27E-08
		变异系数 CV	0.378	- 0.222	0.199	0.209	0.444
		偏斜系数 Skewness	0.296	- 0.509	- 0.162	0.159	- 0.247
		峰态系数 Kurtosis	0.504	1.11	0.151	0.346	- 0.776
	100 cm	均值 Mean	- 2.11E-13	- 5.75E-10	- 8.51E-07	- 1.08E-07	1.24E-07
		最小值 Minimum	- 2.10E-11	- 1.43E-08	- 2.89E-06	- 4.13E-07	3.90E-09
		最大值 Maximum	0	0	- 1.67E-08	1.66E-07	5.16E-07
		标准差 SD	2.10E-12	2.05E-09	4.61E-07	7.13E-08	9.94E-08
		变异系数 CV	- 9.96	- 3.57	- 0.541	- 0.663	0.802
		偏斜系数 Skewness	- 10.0	- 5.03	- 1.055	- 0.375	2.03
		峰态系数 Kurtosis	100	27.06	2.69	4.08	4.99

注: 表中通量的值为负表示入渗 Note: Negative values of the flux mean infiltration

降低,加之浅层根系在生育后期已经死亡,作物根系不能从土壤浅层吸收水分,必须依靠较深处的根系利用更深层的土壤水分满足其生长需要。而对应于20 cm和100 cm深度处的Atrazine通量都很小,在20 cm深度处为中等到强变异,在100 cm深度处为强变异。由于水流通量的影响,在20 cm深度处,仅有第31天的Atrazine通量是向下的,并且其绝对值与其他时刻相比相对较大。此外,还可以看出,在第6天和第31天,有的土壤剖面在100 cm深度处没有Atrazine的淋失。

由图2可以看出模拟小区内各采样点所处土壤剖面的水分运动情况。显然,在模拟小区土壤的两个不同深度(20 cm和100 cm)处的水流通量,在各土壤剖面同一模拟时刻是有差别的。在第6天时,虽然所有采样点所处土壤剖面的水分湿润锋均通过了20 cm深度处(图1),但它的通量是向上的;而100 cm深度处,虽从计算结果可知有相当一部分采样点所处剖面的水分湿润锋到达了该处,但在绝大多数剖面通过该深度处的土壤水流通量很小;在第31天时,通过20 cm深度处土壤水流通量的绝对值,在100号采样点所处剖面明显地小于其他采样点所处

剖面的值,而100 cm深度处模拟小区中部的土壤剖面的水流通量较大;第55天和第77天时,由计算结果可知所有采样点所处剖面的水分湿润锋均经过了土壤100 cm深度处,对应于20 cm和100 cm深度处的非饱和和水力传导度的变异系数在第55天时分别为21.26%和27.10%;在第77天时分别为9.42%和21.84%;第109天时,100 cm深度处的水流通量与它在第31天时的分布格局相同,只是土壤水的运动方向相反。在20 cm和100 cm这两个深度处,相应于各模拟时刻的最大土壤水流通量的剖面采样点编号分别为39、69、2、2和39及12、70、70、100和12;最小土壤水流通量的剖面采样点编号分别为100、100、12、12和100及100、100、12、28和100。可见,在这两个深度处,100号采样点所处土壤剖面的水流通量常常是最小的,这可能是由于该采样点土壤质地的粘粒含量最高、干容重较大、饱和导水率最小,同时,水分运动过程中该剖面的非饱和土壤水力传导度经常最小。通过对模拟时刻各采样点所处土壤剖面在这两个深度处的非饱和水力传导度的计算,表明该参数较大的采样点所在的土壤剖面,在这两个深度处的土壤水流通量较大。



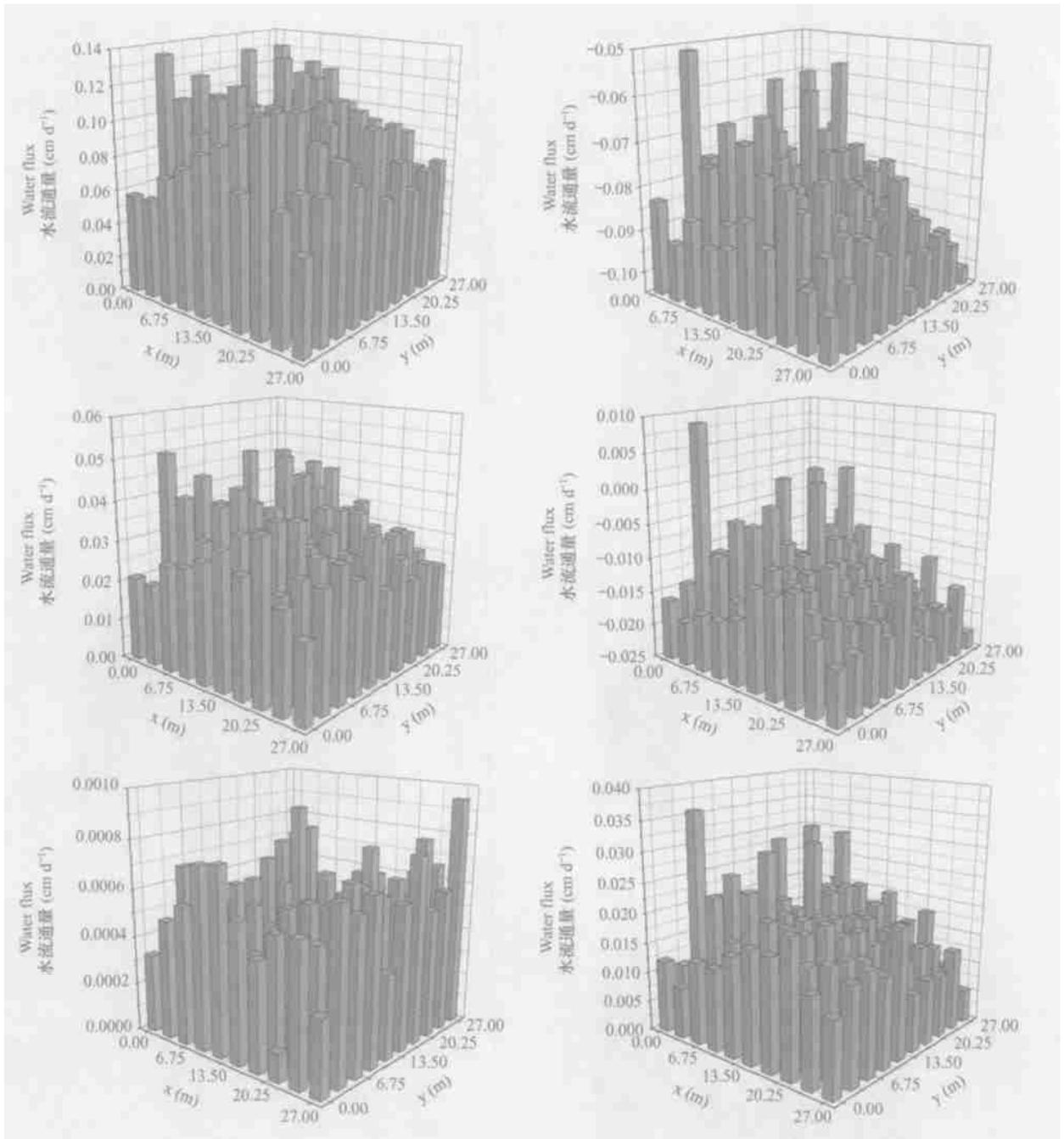


图2 模拟小区各采样点所在土壤剖面的 20 cm(左侧)和 100 cm(右侧)处的水流量
(从上到下对应的模拟时间分别是第 6、31、55、77、109 天)

Fig 2 Soil water flux of each soil profile at depths of 20 cm (left) and 100 cm (right) of study plot
(The simulation time is 6, 31, 55, 77 and 109 days, from top to bottom, respectively)

为了清晰地显示并比较 Atrazine 在模拟小区内淋溶行为的空间变异,我们将实际计算的 Atrazine 在土壤剖面 20 cm 深度处的淋溶通量乘以 10^6 示于图 3 中。可见模拟小区内各采样点所代表的土壤剖面中 Atrazine 淋溶的差异是存在的,相同模拟时刻相同深度处 Atrazine 的通量分布依赖于水流通量的分布。相应于 5

个输出时刻的最大通量的剖面采样点编号分别为 39、70、2、2 和 39;最小通量的剖面采样点编号分别为 100、33、12、12 和 41;水流通量最大(小)的剖面采样点并不都是 Atrazine 通量最大(小)的剖面采样点,这是因为各剖面土壤对 Atrazine 吸附程度的不同,对应于第 6、31、55、77 和 109 天 20 cm 深度处的最大 Atrazine 浓度所在的剖

面采样点编号分别为 6、70、70、70、70, 相应的 Atrazine 浓度分别为 0.606、0.652、0.288、0.185、0.166 mg L^{-1} ; 对应于这 5 个输出时刻的最小 Atrazine 浓度所在的剖面采样点均为 33, 相应的 Atrazine 浓度分别为 0.144、0.194、

0.120、0.090、0.066 mg L^{-1} 。在第 31 天, 模拟的 Atrazine 的质量通量是向下的, 此时, 图中显示的直方柱较低的点位处的土壤剖面是较易淋失 Atrazine 的; 在其他模拟时刻, 向上运移的 Atrazine 是很少的。

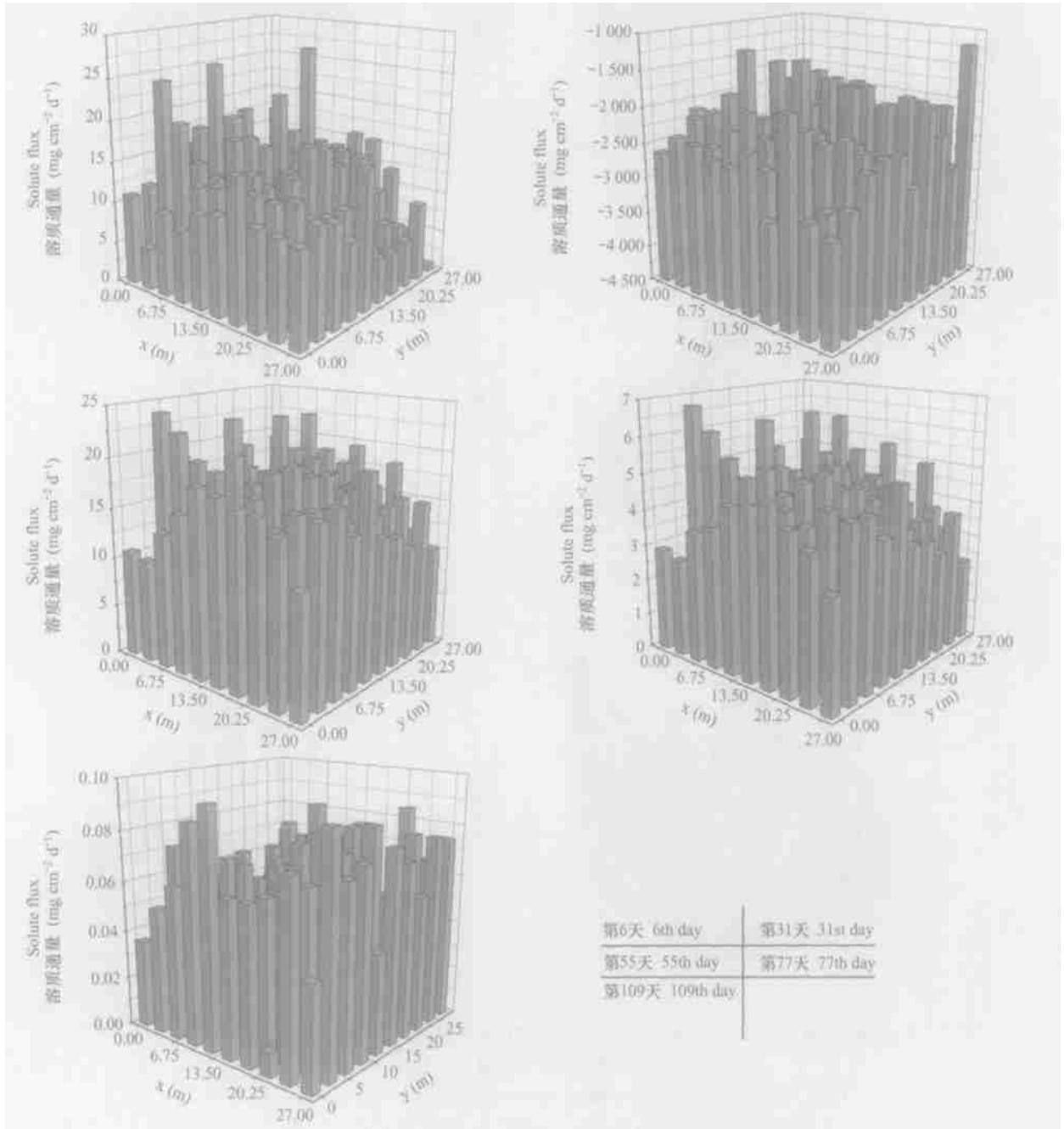


图3 永乐店试验站模拟小区各采样点所在土壤剖面的 20 cm 处的溶质通量 (图中的溶质通量为放大 10^6 倍)

Fig 3 Solute flux of each soil profile at depth of 20 cm of study plot at the Yongledian Experimental Station

(Solute fluxes in figures were true solute flux multiplied by 10^6)

由表 3 可见, 在不同生育期夏玉米蒸腾量的差别很大, 而模拟小区内各采样点所处土壤剖面处夏玉米的蒸腾量差异不大, 变异小于 4.26%, 这主

要是由于数值模拟时对各采样点所处土壤剖面应用的根系吸水模型的输入参数相同, 差异仅仅是由各剖面土壤物理性质的不同而造成的土壤供水能力

不同导致的。土壤剖面 250 cm 深度处累积的渗透水量随着生育期的延长而逐渐增大,但在夏玉米收获时累积的最大土壤水分渗透量也只有 16.9

mm, 这表明在夏玉米整个生育期内的灌溉和降雨,基本上都贮存在 250 cm 以上的土体内或被用于蒸散。

表 3 不同模拟时段的蒸腾量及剖面 250 cm 深度处的土壤水累积渗透量

Table 3 Transpiration and cumulative percolation of water at the depth of 250 cm at different simulation periods

参量 Parameter	统计特性 Statistical characteristics	时间 Time				
		6 d	31 d	55 d	77 d	109 d
下渗水量 Water percolation (cm)	均值 Mean	0.001 5	0.007 9	0.014 0	0.028 8	0.133
	最小值 Minimum	0.000 1	0.000 3	0.000 5	0.000 7	0.001 0
	最大值 Maximum	0.006 8	0.034 8	0.058 6	0.521	1.69
	标准差 SD	0.001 2	0.006 4	0.011 2	0.062 7	0.279
	变异系数 CV	0.814	0.814	0.802	2.17	2.10
	偏斜系数 Skewness	1.93	1.92	1.84	5.93	3.84
	峰态系数 Kurtosis	5.12	5.10	4.64	41.0	16.7
蒸腾 Transpiration (cm)	均值 Mean	0	0.412	4.57	11.6	18.0
	最小值 Minimum	0	0.367	4.36	11.4	17.5
	最大值 Maximum	0	0.445	4.66	11.7	18.3
	标准差 SD	0	0.017 5	0.051 3	0.081 5	0.162
	变异系数 CV		0.042 6	0.011 2	0.007 0	0.009 0
	偏斜系数 Skewness		- 0.566	- 1.08	- 0.995	- 0.889
	峰态系数 Kurtosis		- 0.340	1.74	0.515	0.955

将HYDRUS 1D 软件输出的模拟小区内各采样点所在土壤剖面的 Atrazine 在土壤表面和根区的浓度进

行统计分析如下表(表 4)。可见, Atrazine 在土壤表面和根区的平均浓度随着时间的增长而越来越低。

表 4 不同模拟时刻 Atrazine 在土壤表面的浓度和根区的平均浓度

Table 4 Concentration of atrazine at the soil surface and root zone at different simulation times

参量 Parameter	统计特性 Statistical characteristics	时间 Time				
		6 d	31 d	55 d	77 d	109 d
土壤表面浓度 Atrazine conc. at the soil surface (mg L ⁻¹)	均值 Mean	1.37	0.226	0.214	0.126	0.096 5
	最小值 Minimum	0.756	0.136	0.141	0.066 6	0.045 0
	最大值 Maximum	3.45	0.241	0.267	0.149	0.120
	标准差 SD	0.406	0.013 4	0.026 7	0.012 5	0.011 7
	变异系数 CV	0.296	0.059 0	0.125	0.099 2	0.121
	偏斜系数 Skewness	1.77	- 3.76	- 0.273	- 1.50	- 1.05
	峰态系数 Kurtosis	6.16	21.2	- 0.326	4.69	3.19
根区平均浓度 Mean atrazine conc. at the root zone (mg L ⁻¹)	均值 Mean	1.28	0.294	0.169	0.087 3	0.059 0
	最小值 Minimum	0.722	0.219	0.094 0	0.040 7	0.025 5
	最大值 Maximum	2.75	0.338	0.257	0.137	0.099 2
	标准差 SD	0.333	0.026 1	0.028 3	0.017 1	0.013 0
	变异系数 CV	0.260	0.088 7	0.167	0.196	0.221
	偏斜系数 Skewness	1.26	- 0.387	0.169	0.096 4	0.278
	峰态系数 Kurtosis	3.12	- 0.443	0.349	0.383	0.464

2.2 输入参数(量)和输出结果的半方差分析

采用 GEOPACK(Version 1.0)软件^[25]对模型的输入参数(量)和模拟结果进行了地质统计学分析。土壤特性参数及 Atrazine 的运移和吸附参数的结果分析见表 5。可见:土壤干容重、粘粒含量和饱和导水率具有较大的相关距离,而吸附参数的相关距离最短,这与该采样小区土壤有机碳的变异有关。表达成总半方差百分

比的块金半方差使得我们能够在土壤的性质中比较块金效应的相关大小^[2],使用这个比值可以定义土壤变量空间相关性确切等级^[2]:比值小于等于 0.25,说明变量是空间强烈依赖的;比值为 0.25~0.75,变量是空间中等级依赖的;大于 0.75,变量是空间弱依赖的。因此,在模拟小区,除 Atrazine 的吸附系数具有强烈的空间相关性外,其它参数(量)均具有中等的空间相关性。

表 5 土壤特性参数(量)及 Atrazine 吸附与运移参数的半方差分析

Table 5 Semivariance analysis of the parameters of soil properties and atrazine transport and adsorption

参数(量) Parameter	模型 Model	块金值 Nugget	基台值 Sill	块金/基台 Nugget/Sill	变程(m) Range	离差平方和 SSQ
θ_r	球状 Spherical	3.08E-05	5.86E-05	0.525	11.0	8.51E-11
θ_s	球状 Spherical	1.44E-04	2.43E-04	0.592	8.95	1.41E-09
α	球状 Spherical	3.07E-05	4.18E-05	0.733	14.0	3.24E-11
n	球状 Spherical	1.60E-03	3.39E-03	0.472	7.70	5.37E-07
K_s	球状 Spherical	79.7	109.	0.729	18.6	401.
砂粒 Sand	球状 Spherical	59.5	91.1	0.653	11.3	287.
粉粒 Silt	球状 Spherical	34.5	50.1	0.688	11.8	68.9
粘粒 Clay	高斯 Gaussian	9.10	14.7	0.617	20.3	4.71
干容重 Bulk density	球状 Spherical	2.67E-03	4.39E-03	0.607	26.3	2.19E-07
K_d	球状 Spherical	1.13E-05	1.32E-02	0.001	4.77	1.65E-05
λ_y	球状 Spherical	16.7	28.7	0.584	9.85	45.8

本研究还采用地质统计学分析了模拟小区各采样点土壤剖面 20 cm 处在不同时刻的主要模拟结果(表 6),即:土壤水负压、Atrazine 浓度和土壤水流通量的空间变异结构,以定量地探讨这些变量的空间相关关系。可见,模拟小区 20 cm 处的 Atrazine

浓度、土壤水负压和水流通量的变程多在 8~10 m 左右,这提示我们若想对永乐店模拟小区土壤 20 cm 深度处的含水量和 Atrazine 浓度进行监测和取样测定,监控网点的布设距离可取为 8~10 m 左右。

表 6 夏玉米不同生育阶段剖面 20 cm 处土壤水负压、水流通量和 Atrazine 浓度的半方差分析

Table 6 Semivariance analysis of soil water negative pressure, soil water flux and atrazine concentration at the depth of 20 cm at the various growth stages of summer maize

参量 Parameter	时间 Time (d)	模型 Model	块金值 Nugget	基台值 Sill	块金/基台 Nugget/Sill	变程(m) Range	离差平方和 SSQ
浓度 c	6	球状 Spherical	0	5.97E-03	0	4.76	1.29E-06
	31	球状 Spherical	3.73E-03	5.54E-03	0.673	10.5	1.23E-06
	55	球状 Spherical	5.64E-04	8.74E-04	0.645	10.0	3.56E-08
	77	球状 Spherical	2.45E-04	3.76E-04	0.652	9.75	7.90E-09
	109	球状 Spherical	2.61E-04	4.01E-04	0.651	9.88	7.68E-09
通量 Flux	6	线性无基台 Linear	5.19E-05	2.39E-06(斜率)			1.01E-08
	31	球状 Spherical	6.43E-02	0.105	0.610	9.21	1.05E-04
	55	球状 Spherical	2.49E-04	0	0.529	8.69	3.83E-09
	77	球状 Spherical	3.01E-05	5.50E-05	0.548	8.69	7.36E-11
	109	球状 Spherical	4.58E-09	3.81E-08	0.120	5.26	5.38E-17
负压 h	6	球状 Spherical	4930	9496	0.519	8.52	5.64E+06
	31	球状 Spherical	441	864	0.511	8.02	5.64E+04
	55	球状 Spherical	6245	11767	0.531	8.58	7.57E+06
	77	球状 Spherical	11504	22241	0.517	8.56	2.36E+07
	109	球状 Spherical	72421	125192	0.578	10.8	1.27E+08

3 结 论

通过在北京通州区永乐店节水农业试验站的农田采集大量的土壤样品, 测试其常规的理化特性, 间接获得了模拟小区各采样点所代表的土壤剖面的水力学参数、Atrazine 的弥散度和吸附系数, 在此基础上, 应用 HYDRUS-1D 软件对夏玉米生育期农田气象条件下 Atrazine 在土壤中淋溶行为的空间分布动态进行了数值模拟, 这为模拟小区农田尺度下的节水灌溉和精准施药提供了一定的科学依据。模拟结果表明: 在本研究的模拟条件下, 在夏玉米的一个生育期内, Atrazine 不可能运移通过非饱和带土壤到达浅层地下水表面处。此外, 对模型输入参数(量)和输出结果进行的地质统计学分析表明: 永乐店模拟小区剖面 20 cm 处的 Atrazine 浓度、土壤水负压和水流通量的变程多在 8~10 m 左右, 这一分析结果对指导规划和设计该小区农田尺度土壤水分运动和 Atrazine 淋溶动态监控网具有一定的参考意义。

本文对自然气象条件下农田尺度 Atrazine 在非饱和土壤中淋溶动态空间分布的数值模拟还是初步的, 为了运用数值模拟方法更加客观地预报该农药对浅层地下水的污染风险, 不同气象条件和水文年型下, 特别是长期天气条件下, 对 Atrazine 在冬小麦—夏玉米轮作制度的农田尺度土壤中的运移动态进行数值分析是需要进一步加以研究的。

致 谢 中国农业大学水利与土木工程学院的黄冠华教授提供了部分土壤干容重数据和气象观测资料, 田间取样得到了北京市水利科学研究所永乐店试验站赵立新工程师的支持。

参 考 文 献

[1] Sovik A K, Aagaard P. Spatial variability of a solid porous framework with regard to chemical and physical properties. *Geoderma*, 2003, 113: 47~76

[2] Cambardella C A, Moorman T B, Novak J M, *et al.* Field scale variability of soil properties in central Iowa soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 1994, 58: 1 501~1 511

[3] Rover M, Kaiser E A. Spatial heterogeneity within the plough layer: Low and moderate variability of soil properties. *Soil Biology and Biochemistry*, 1999, 31: 175~187

[4] Lopez Granados F, Jurado Exposito M, Atenciano S, *et al.* Spatial variability of agricultural soil parameters in southern Spain. *Plant and Soil*, 2002, 246: 97~105

[5] Levy J, Chesters G. Simulation of atrazine and metabolite transport

and fate in a sandy till aquifer. *J. Contam. Hydrol.*, 1995, 20: 67~88

- [6] Scheibe T, Yabusaki S. Scaling of flow and transport behavior in heterogeneous groundwater systems. *Adv. Water Resour.*, 1998, 22 (3): 223~238
- [7] Kelleners T J, Beekma J, Chaudhry M R. Spatially variable soil hydraulic properties for simulation of field scale solute transport in the unsaturated zone. *Geoderma*, 1999, 92: 199~215
- [8] Khaleel R, Yeh T-C J, Lu Z. Upscaled flow and transport properties for heterogeneous unsaturated media. *Water Resour. Res.*, 2002, 38 (5): 1F 01~1F 12
- [9] Novak J M, Moorman T B, Cambardella C A. Atrazine sorption at the field scale in relation to soils and landscape position. *J. Environ. Qual.*, 1997, 26: 1 271~1 277
- [10] Jacques D, Mouvet C, Mohanty B, *et al.* Spatial variability of atrazine sorption parameters and other soil properties in a podzoluvic soil. *J. Contam. Hydrol.*, 1999, 36: 31~52
- [11] 毛萌, 任理. 农田尺度降雨入渗—重分布条件下阿特拉津在非饱和土壤中淋溶风险的评价. *土壤学报*, 2005, 42(2): 177~186. Mao M, Ren L. Risk assessment of atrazine leaching in soil at field scale level (In Chinese). *Acta Pedologica Sinica*, 2005, 42(2): 177~186
- [12] Simunek J, Sejna M, van Genuchten M Th. The HYDRUS 1D software package for simulating water flow, heat, and solute transport in one dimensional variably saturated media. Version 2.0. IGWMC TPS70, International Ground Water Modeling Center, Colorado School of Mines, Golden, Colorado. 1998
- [13] 王树安. 作物栽培学各论. 北京: 中国农业出版社, 1995. 136, 169~170. Wang S A. Crop Plant and Cultivation (In Chinese). Beijing: China Agricultural Press, 1995. 136, 169~170
- [14] 王忠孝主编. 山东玉米. 北京: 中国农业出版社, 1999. 481. Wang Z X. ed. Shandong Maize (In Chinese). Beijing: China Agricultural Press, 1999. 481
- [15] Warrick A W. *Soil Physics Companion*. Boca Raton, Florida: CRC Press, 2002. 59
- [16] 陈玉民, 郭国双, 王广兴, 等著. 中国主要作物需水量与灌溉. 北京: 中国水利水电出版社, 1995. 87~91. Chen Y M, Guo G S, Wang G X, *et al.* eds. Main Crop Water Requirements and Irrigation in China (In Chinese). Beijing: China Water Power Press, 1995. 87~91
- [17] 陈国平编著. 夏玉米的栽培. 北京: 农业出版社, 1994. 1, 77. Chen G P. ed. Cultivation of Summer Maize (In Chinese). Beijing: Agricultural Press, 1994. 1, 77
- [18] 郑斐能, 洪锡午, 韩德元, 等. 农药使用技术手册. 北京: 中国农业出版社, 2000. 220~221. Zheng F N, Hong X W, Han D Y, *et al.* Technical Manual of Pesticide Usage (In Chinese). Beijing: China Agricultural Press, 2000. 220~221
- [19] 许迪, 蔡林根, 王少丽, 等编著. 农业可持续发展的农田水土管理研究. 北京: 中国水利水电出版社, 2000. 227. Xu D, Cai L G, Wang S L, *et al.* eds. Soil and Water Management in Agricultural Sustainable Development (In Chinese). Beijing: China Water Power Press, 2000. 227

- [20] 林玉锁, 龚瑞忠, 朱忠林编著. 农药与生态环境保护. 北京: 化学工业出版社, 2001. 13~ 21. Lin Y S, Gong R Z, Zhu Z L. eds. Pesticide and Environmental Protection (In Chinese). Beijing: Chemical Industry Press, 2001. 13~ 21
- [21] Ahrens W H. WSSA Herbicide Handbook. 7th Ed. USA: Champaign, Illinois 61821-3133. 1994. 20~ 22
- [22] 赵秉强, 张福锁, 李增嘉, 等. 间套作条件下作物根系数量与活性的空间分布及变化规律研究. II. 间作早春玉米根系数量与活性的空间分布及变化规律. 作物学报, 2001, 27(6): 974~ 979. Zhao B Q, Zhang F S, Li Z J, *et al.* Vertical distribution and its change of root quantity & activity of crops in the "winter white // early spring maize/ summer maize" cropping system. II. The vertical distribution and its changes of root quantity & activity of the early spring inter planted maize (In Chinese). Acta Agronomica Sinica, 2001, 27(6): 974~ 979
- [23] Ritchie J T, Godwin D. Chapter 3: Soil Water Balance. In CERES Wheat 2.0
- [24] 林忠辉, 项月琴, 莫兴国, 等. 夏玉米叶面积指数增长模型的研究. 中国生态农业学报, 2003, 11(4): 69~ 72. Lin Z H, Xiang Y Q, Mo X G, *et al.* Normalized leaf area index model for summer maize (In Chinese). Chinese Journal of Eco Agriculture, 2003, 11(4): 69~ 72
- [25] Yates S R, Yates M V. Geostatistics for waste management: A user's manual for the GEOPACK (Version 1.0) geostatistical software system. Interagency Agreement No. DW12932632. U. S. Environmental Protection Agency, ADA, OKLAHOMA, 1990

NUMERICAL SIMULATION OF ATRAZINE LEACHING IN SOILS UNDER AGRICULTURAL METEOROLOGICAL CONDITION

Mao Meng^{1, 2} Ren Li^{1, 2*}

(1 Department of Soil and Water Sciences, China Agricultural University, Beijing 100094, China)

(2 Key Laboratory of Plant Soil Interactions, MOE, Beijing 100094, China)

Abstract Atrazine is an herbicide commonly used on summer maize throughout North China, where the growing period of summer maize coincides with the rainy season. It is, therefore, of great significance to protection of the shallow groundwater environment to assess leaching risk of atrazine at field scale. In this study, with a small agricultural plot (27 m × 27 m) at Yongledian Experimental Station, Tongzhou District, Beijing as background, soil samples were collected and analyzed for soil physicochemical properties and the meteorological data of the year of 2001 were gathered. On such a basis and the assumption of column model, numerical simulations of the spatial distribution of atrazine leached dynamics at field scale were conducted with spatial variability of the soil hydraulic parameters and the atrazine transport and adsorption parameters taken into account. And then geostatistical analysis was carried out of spatial variance structure of soil water negative pressure, water flux and atrazine concentration at 20 cm depth during the growing stage of summer maize. Results show that, variograms of the three variables during the summer maize growing season were basically spherical models, and most variograms had ranges about 8 to 10 m. This approach of the study can be used as reference in designing and laying out a monitoring network for water movement and atrazine transport at field scale.

Key words Soil; Atrazine; Field scale; Leaching; Numerical simulation; Geostatistics