

农药在土壤中迁移及其影响因素的初步研究

杨大文 杨诗秀

(清华大学水利水电系, 100084)

莫汉宏

(中国科学院生态环境研究中心)

摘 要

本文运用非饱和土壤中水分运动和溶质运移基本理论,建立了非饱和土壤中农药运移的数值模拟模型。模型中考虑了农药在土壤中迁移与转化的主要过程:附土壤水分的对流;水动力弥散;土壤吸附及生物化学降解等。模型得到了室内土柱中灭幼脲-III号杀虫剂淋溶试验的验证。文中分析了各种因素对该农药在土壤中迁移的影响,并且对两种不同的农药进行了比较。研究表明,在本文所研究的条件下影响农药在土壤中迁移与转化的主要因素是土壤吸附和农药在土壤中的降解。

关键词 农药,迁移与转化,数学模型

在现代社会中,农药在农业及公共卫生等部门起着重要的作用。在农业方面,农药的使用已成为与施肥同样重要的农业措施。它在带给人类巨大效益的同时,又对生态环境构成威胁。农药在环境中的迁移途径十分复杂,可由土壤表面挥发进入大气;受淋溶进入地下水;或经径流进入地表水体。土壤是农药在环境中迁移和转化的最重要的环境因素。因此,研究农药在土壤中迁移与转化规律在理论上或生产实践中都有重要意义,受到各国科技工作者普遍关注。国外从70年代开始研究,已取得许多成果,目前已开始采用数学模拟方法来预测农药在田间的迁移与分布^[1-3];而我国用数学模拟手段研究农药在非饱和土壤中的迁移与转化尚处于起步阶段。本文采用数值模拟方法,结合灭幼脲-III号杀虫剂来研究农药在土壤中的迁移,探讨各种因素对农药在土壤中迁移的影响。

一、非饱和土壤中的农药运移模型及数值解法

(一) 非饱和土壤中的农药运移模型

农药在土壤中的运移主要是以土壤溶质形式随水分运动,所以农药运移模型是由土壤水分运动和土壤溶质运移两部分组成。

1. 水分运移模型:在描述室内土柱或田间较均质的土壤中的水分运动时,可将其近似为一维运动。这时土壤水分运动方程表示为:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial Z} \left[D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial Z} \right] - \frac{\partial K(\theta)}{\partial Z} \quad (1)$$

式中 θ 为土壤体积含水率 (cm^3/cm^3); t 为时间 (min); Z 为垂向坐标 (cm), 向下为正; $D(\theta)$ 为非饱和土壤水分扩散率 (cm^2/min); $K(\theta)$ 为土壤非饱和导水率 (cm/min)。 $D(\theta)$ 、 $K(\theta)$ 可采用如下经验公式表示:

$$D(\theta) = D_0 \theta^m \quad (2)$$

$$K(\theta) = K_0 e^{b\theta} \quad (3)$$

模型的初始条件及边界条件根据具体情况而定。

2. 溶质运移模型: 农药在土壤中的迁移与转化是一个复杂的物理、化学及生物变化过程, 通过对流和水动力弥散来实现。其运移主要以液态形式进行, 液相以外还有动态贮存, 该变化量以单位体积土壤中液相以外的溶质贮存量 σ_e 表示。农药在迁移过程中还伴随着生物化学降解, 作物吸收等, 将这些变化量以总的源汇项 ϕ 表示。这样, 非饱和土壤中一维垂向的农药运移基本方程可表示为:

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \frac{\partial \sigma_e}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial Z} \left[D_{11}(\theta, q) \frac{\partial C}{\partial Z} \right] - \frac{\partial(qC)}{\partial Z} + \phi \quad (4)$$

式中 C 是农药的液相浓度 ($\mu\text{g}/\text{cm}^3$); q 是达西流速 (cm/min); σ_e 是液相以外的动态贮存项; ϕ 是源汇项。 D_{11} 是非饱和土壤水动力弥散系数 (cm^2/min), 可用下列经验公式表示:

$$D_{11}(\theta, q) = \lambda |q| + D_0 a e^{b\theta} \quad (5)$$

其中, D_0 为溶质在水体中的分子扩散系数 (cm^2/min); a 、 b 、 λ 为经验常数。

农药在土壤中的动态贮存主要是土壤吸附。土壤中吸附相浓度与液相浓度用 Freundlich 公式表示为:

$$C_s = K_d C^{1/n} \quad (6-a)$$

$$\text{或} \quad C_s = K_D C \quad (6-b)$$

式中 C_s 为吸附相浓度 ($\mu\text{g}/\text{g}$); C 为液相浓度 ($\mu\text{g}/\text{cm}^3$); K_d 、 K_D 为吸附常数; $1/n$ 表示非线性程度。若用线性关系则土壤中液相以外的动态贮存项 σ_e 表示成:

$$\sigma_e = \rho K_D C \quad (7)$$

其中 ρ 为土壤体积密度 (g/cm^3)。

在源汇项中只考虑降解, 降解模型采用土壤中所有农药都按一级动力学规律处理, 则 ϕ 表示为:

$$\phi = -K(\theta + \rho K_D)C \quad (8)$$

式中 K 是农药的总降解速率常数 ($1/\text{min}$)。

将式(7)、式(8)代入式(4)得:

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho K_D C)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial Z} \left[D_{11}(\theta, q) \frac{\partial C}{\partial Z} \right] - \frac{\partial(qC)}{\partial Z} - K(\theta + \rho K_D)C \quad (9)$$

模型的定解条件根据具体情况而定。

(二) 非饱和土壤中农药运移模型的数值解法

1. 水分运移模型的数值解法: 将整个计算域离散化, 按隐式差分格式写出式(1)的

差分方程如下:

$$\frac{\theta_i^{k+1} - \theta_i^k}{\Delta t} = \frac{D_{i+\frac{1}{2}}^{k+1}(\theta_{i+1}^{k+1} - \theta_i^{k+1}) - D_{i-\frac{1}{2}}^{k+1}(\theta_i^{k+1} - \theta_{i-1}^{k+1})}{\Delta Z^2} - \frac{K_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} - K_{i-\frac{1}{2}}^{k+1}}{2\Delta Z} \quad (10)$$

$$\text{或} \quad -r_1 D_{i-\frac{1}{2}}^{k+1} \theta_{i-1}^{k+1} + [1 + r_1(D_{i-\frac{1}{2}}^{k+1} + D_{i+\frac{1}{2}}^{k+1})] \theta_i^{k+1} - r_1 D_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} \theta_{i+1}^{k+1} \\ = \theta_i^k - r_3(K_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} - K_{i-\frac{1}{2}}^{k+1}) \quad (11)$$

式中 $r_1 = \Delta t / \Delta Z^2$, $r_3 = \Delta t / 2\Delta Z$, i 代表距离结点号, k 代表时段结点号。

当边界条件为第二类边界时, 采用边界处半格水量平衡方程写出其差分式。非结点处的参数值采用“三点式”线性化^[1], 并用迭代法求解。离散化的三对角线性方程组用“追赶法”求解。

2. 溶质运移模型的数值解法: 本文中用控制容积法^[2] 写出溶质运移模型的离散化方程。控制容积边界取在两个结点的中点, 如图1(a)所示。将式(9)变形得

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho C) + \frac{\partial J}{\partial Z} = SC \quad (12)$$

式中 $\rho = \theta + \rho K_D$, $J = qC - D_{ik}(\theta, q) \frac{\partial C}{\partial Z}$, $S = -K(\theta + \rho K_D)$ 。在图1(b)所示的控制容积内对式(12)积分:

$$\int_{z_{i-\frac{1}{2}}}^{z_{i+\frac{1}{2}}} \int_{t_k}^{t_{k+1}} \frac{\partial}{\partial t} (\rho C) dt dZ + \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{z_{i-\frac{1}{2}}}^{z_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\partial J}{\partial Z} dZ dt \\ = \int_{t_k}^{t_{k+1}} \int_{z_{i-\frac{1}{2}}}^{z_{i+\frac{1}{2}}} S \cdot C dZ dt \quad (13)$$

展开得:

$$(\rho_i^{k+1} C_i^{k+1} - \rho_i^k C_i^k) \Delta Z + (J_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} - J_{i-\frac{1}{2}}^{k+1}) \Delta t = S_i^{k+\frac{1}{2}} C_i^{k+\frac{1}{2}} \Delta Z \Delta t \quad (14)$$

在计算溶质通量 J 时, 弥散项采用中心差分, 对流项则根据 P_i 值 ($= \frac{q \cdot \Delta Z}{D_{ik}}$, 称 Peclet 数) 分别用上风差分或线性插值。写出溶质通量的差分式如下:

$$J_{i+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} = q_{i+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} (\beta_1 C_i^{k+\frac{1}{2}} + \beta_2 C_{i+1}^{k+\frac{1}{2}}) \\ - (D_{ik})_{i+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} \frac{C_{i+1}^{k+\frac{1}{2}} - C_i^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta Z} \quad (15)$$

$$J_{i-\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} = q_{i-\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} (\beta_3 C_{i-1}^{k+\frac{1}{2}} + \beta_4 C_i^{k+\frac{1}{2}}) \\ - (D_{ik})_{i-\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} \frac{C_i^{k+\frac{1}{2}} - C_{i-1}^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta Z} \quad (16)$$

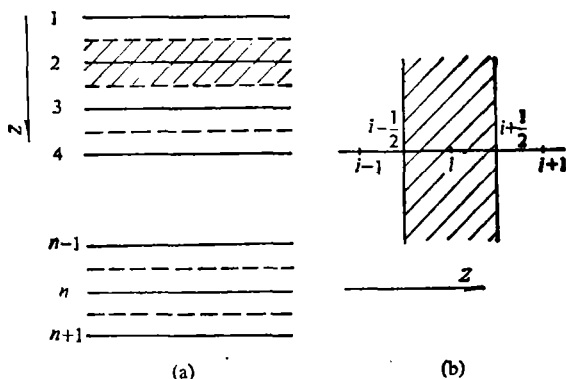


图1 一维情况的控制容积

Fig. 1 The control volume for one-dimension case

当 $|P_{a1}| = \left| \frac{q_{i-\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} \cdot \Delta Z}{(D_{ik})_{i-\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}}} \right| \geq 2$, $|P_{a2}| = \left| \frac{q_{i+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} \cdot \Delta Z}{(D_{ik})_{i+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}}} \right| \geq 2$ 时, 则采用上风差分法。即式

(15)、式(16)中 $\beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4$ 的取值如下:

当 $q_{i+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} > 0$ 时, $\beta_1 = 1, \beta_2 = 0$;

当 $q_{i+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} < 0$ 时, $\beta_1 = 0, \beta_2 = 1$;

当 $q_{i-\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} > 0$ 时, $\beta_3 = 1, \beta_4 = 0$;

当 $q_{i-\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} < 0$ 时, $\beta_3 = 0, \beta_4 = 1$ 。

反之,则采用线性插值,即式(15)、式(16)中 $\beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4$ 取值均为 $1/2$ 。

将式(15)和式(16)代入式(14),整理后得:

$$a_i C_{i-1}^{k+1} + b_i C_i^{k+1} + c_i C_{i+1}^{k+1} = h_i \quad (17)$$

式中:

$$a_i = \frac{1}{2} \left[-\beta_1 q_{i-\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} - \frac{(D_{1k})_{i-\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta Z} \right]$$

$$b_i = \frac{\Delta Z}{\Delta t} \rho_i^{k+1} + \frac{1}{2} \left[\beta_1 q_{i+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} - \beta_4 q_{i-\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} + \frac{(D_{1k})_{i+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} + (D_{1k})_{i-\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta Z} + S_i^{k+\frac{1}{2}} \cdot \Delta Z \right]$$

$$c_i = \frac{1}{2} \left[\beta_2 q_{i+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} - \frac{(D_{1k})_{i+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta Z} \right]$$

$$h_i = -a_i C_{i-1}^k + \left[-h_i + \frac{\Delta Z}{\Delta t} (\rho_i^k + \rho_i^{k+1}) \right] C_i^k - c_i C_{i+1}^k$$

当上边界为第二类边界条件时,采用边界处半格质量平衡写出差分方程。求解中为了减少数值弥散,当 $|P_e| \geq 2$ 时,令 $D_{1k} = 0$ 。离散化的三对角线性方程组采用 Thomas 算法^[2]求解。

(三) 非饱和土壤中农药运移模型的检验

为了验证模型的正确性,进行了两个土柱的室内淋溶试验(取名为A柱、B柱)。试验中采用的农药为灭幼脲-III号杀虫剂,土样取自北方菜地,土质为壤土,干容重取 $1.2 \text{ (g/cm}^3\text{)}$,农药以液态施于地表,供水采用均匀喷洒。A、B两柱横截面积分别为 87.3 cm^2 、 83.34 cm^2 ;土壤初始含水率分别为 $0.08 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ 、 $0.105 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$;降雨强度为 0.5863 cm/h 和 0.5375 cm/h ;淋溶时间分别为 29.5 h 和 34.6 h ;总施药量分别为 12.5 mg 和 15 mg 。土壤水分参数测定结果如下:

1. 非饱和土壤水分扩散率:

$$D(\theta) = \begin{cases} 0.08747\theta^{1.0586} & 0 < \theta \leq 0.1539 \\ 62.2093\theta^{5.3682} & 0.1539 < \theta < 0.4485 \\ 6.5252 \times 10^4 \theta^{14.0416} & \theta > 0.4485 \end{cases} \quad \text{cm}^2/\text{min}$$

2. 土壤非饱和导水率:

$$K(\theta) = 5.9215 \times 10^{-9} e^{30.1512\theta} \text{ cm/min}$$

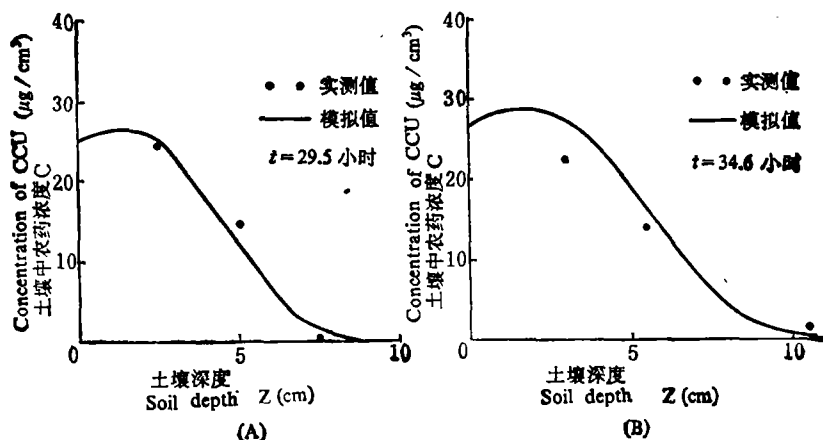


图2 A、B两柱中农药的浓度分布

Fig. 2 The concentration distribution of CCU in column A and B

灭幼脲-III号在土壤中的吸附用 Freundlich 公式表示为: $C_s = 37.2C^{0.734}$ 式中 C_s 单位为 $\mu\text{g/g}$; C 的单位为 $\mu\text{g/cm}^3$ 。总降解半衰期为 15.54d。

根据A柱的淋溶结果,参照式(5)采用数值模拟方法反求出土壤水动力弥散系数为:

$$D_{11}(\theta, q) = 6.0|q| + 0.8 \times 10^{-3} \times 0.003e^{100} \text{cm}^2/\text{min}$$

利用前面所确定的参数,对B柱中的淋溶进行了数值模拟,计算结果与实测结果如图2所示。从图中可见,模拟值与实测值比较接近,说明所建立的数值模型是可信的。

二、农药在土壤中迁移的影响因素分析

影响农药在土壤中迁移的因素很多,有农药本身的环境性质,也有天然和人工条件等。文中分析了降雨和灌溉,土壤初始含水率,吸附和降解对农药在非饱和土壤中迁移的影响。由于灭幼脲-III号挥发性小,没有考虑对挥发作用的影响。

1. 降雨和灌溉的影响: 这里讨论了不同降雨量和淹灌条件下灭幼脲-III号杀虫剂在北方菜地中的迁移情况。施药模拟田间情况,全部施于地表,施药量为 150 g/ha 。为了简化,假设降雨强度不变(为 4.8 mm/h),降雨量的不同只是降雨历时的不同,文中计算了降雨 12h, 24h, 48h (分别列为方案 1、2、3)。淹灌条件只考虑表面薄层积水情况,淹灌时间为两天(方案 4)。降雨或灌溉后处于蒸发状态,土面蒸发强度为 3.5 mm/d 。土壤水分参数如前。

表1中给出了四个方案中灭幼脲-III号杀虫剂在土壤中的残留和分布情况。由此可见,随着降雨量的增加,农药在土壤深层的分布增多,但变化幅度不大;在水量相同的条件下,淹灌对农药分布的影响比降雨的影响大。同时,还可以看到,在蒸发条件下农药分布的变化很小。由此可见,农药的淋溶主要是随土壤水分的运动。农药在剖面的总残留量不受降雨或灌溉的影响。

2. 土壤初始含水率的影响: 这里研究了土壤不同初始含水率对灭幼脲-III号杀虫剂迁移的影响。文中分别计算了初始含水率为 0.1、0.2、0.3 三种情况(即方案 1、方案 2、方

表 1 降雨和灌溉对农药残留和分布的影响

Table 1 Influence of rainfall and irrigation on the residual and distribution of pesticide

深 度 (cm) Depth	2 days				7 days			
	方案 (Scheme)				方案 (Scheme)			
	1	2	3	4	1	2	3	4
全剖面	0.911	0.911	0.911	0.911	总残留量 (m_T/m_0)			
					0.718	0.718	0.718	0.718
	残留的分布 (m_i/m_T)							
0—4	0.967	0.953	0.932	0.889	0.964	0.951	0.930	0.890
4—8	0.033	0.047	0.068	0.111	0.036	0.049	0.070	0.110
8—12	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

注: m_0 ——施药量; m_T ——总残留量; m_i ——各层中残留量(下表同)。

案 3)。计算条件如前,降雨历时为两天。

初始含水率对浓度锋面的影响如图 3 所示。由此可知,随着土壤初始含水率的增加,农药的淋溶深度增大,其淋溶性增强,但增加十分有限。土壤初始水分含量对该农药的迁移影响很小。

3. 吸附和降解的影响: 农药本身的环境性质影响农药在土壤中的迁移与转化, 其中主要是吸附和降解。为了探讨吸附和降解对农药在土壤中迁移与转化的影响, 假设其他因素不变。土壤为北方菜地土, 降雨情况、施药情况与前面计算中一致, 降雨历时两天, 计算期为一周。在方案 A_1 、 A_2 、 A_3 中降解半衰期相同(均为 14.54d)。但吸附有差别, 三个方案吸附常数 K_d 分别为 37.2、7.44、3.72 ($1/n$ 均为 0.704)。方案 A_2 、 A_4 中吸附相同, 但降解半衰期相差一倍(方案 4 的降解半衰期为 7.27d)。

对上述四个方案进行计算, 吸附和降解对浓度锋面的影响如图 4 所示, 农药的最大淋

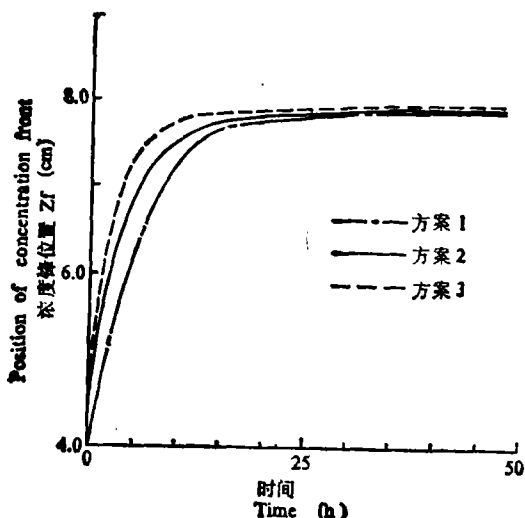


图 3 初始含水率对浓度锋面的影响

Fig. 3 Influence of soil water contents on the concentration front

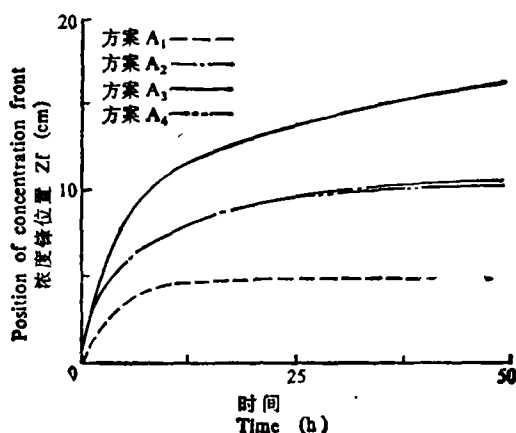


图 4 吸附和降解对浓度锋面的影响

Fig. 4 Influence of sorption and degradation on the concentration front

溶深度分别为 8.0、13.3、17.6 和 13.1cm。从中可见,吸附对淋溶的作用很大,吸附性愈小淋溶性愈强,降解对淋溶几乎没有影响。但吸附不影响农药的残留,降解决定了农药在土壤中的残留。

三、两种不同农药在土壤中迁移与转化规律的比较

为了进一步说明农药在土壤中的迁移与转化规律,这里对灭幼脲-III 号杀虫剂和杀虫双两种性质差别较大的农药在同一种土壤(封丘潮土)中的迁移与转化进行了比较。灭幼脲-III 号吸附性较强,吸附常数为 $K_d = 12.33$, $1/n = 1.08$, 降解半衰期为 15 天;杀虫双的吸附性相对较弱,吸附常数为 $K_d = 0.834$, $1/n = 0.83$, 降解半衰期为 12.3 天。计算条件与前面相同,杀虫双的施药量为 1020 g/ha。土壤为砂壤土,水分参数如下:

非饱和土壤水分扩散率为:

$$D(\theta) = \begin{cases} 2.6842\theta^{1.4504} & \theta < 0.2613 \\ 2.9854 \times 10^6 \theta^{11.4246} & \theta \geq 0.2613 \end{cases} \text{ cm}^2/\text{min}$$

表 2 农药的残留和分布

Table 2 Residual and distribution of pesticide in soil

深度 (cm) Depth	2 days		4 days		7 days	
	灭 III CCU	杀虫双 Dimehypo	灭 III CCU	杀虫双 Dimehypo	灭 III CCU	杀虫双 Dimehypo
全剖面	0.911	0.893	总残留量 (m_T/m_0) 0.828 0.798		0.718	0.675
			残留的分布 (m_i/m) _T			
0—10	0.779	0.180	0.769	0.176	0.773	0.188
10—20	0.196	0.304	0.199	0.277	0.198	0.271
20—30	0.025	0.302	0.033	0.281	0.029	0.274
30—40	0.0	0.170	0.0	0.185	0.0	0.182
40—50	0.0	0.042	0.0	0.070	0.0	0.072
50—60	0.0	0.002	0.0	0.011	0.0	0.013

土壤非饱和导水率为:

$$K(\theta) = 2.9757 \times 10^{-4} C^{24.20730} \text{ cm/min}$$

计算结果表明(表 2),灭幼脲-III 号杀虫剂主要分布在地表 0—20 cm 深度范围内,最大淋溶深度为 29.0cm;杀虫双主要分布于地表 0—40cm 范围内,最大淋溶深度为 60.0cm。说明后者的淋溶性比前者强,但灭幼脲-III 号杀虫剂在这种土壤中的残留量大于杀虫双。

四、结 论

综合前面对灭幼脲-III 号杀虫剂在土壤中迁移与转化规律的研究,可以得到如下的初步结论:

1. 决定灭幼脲-III 号杀虫剂在土壤中迁移与转化的主要因素是其在土壤中的吸附性和降解速度。当吸附性较强时,其淋溶性较差;降解速度愈大,它在土壤中的残留愈少。在北方菜地土中,当 K_D 分别为 37.2 和 3.72 ($1/n = 0.704$), 在同样的降解条件下灭幼脲-III 号杀虫剂的淋溶深度分别为 8.0cm 和 17.6cm; 当降解半衰期 $t_{1/2}$ 分别为 14.54d 和 7.27d 时, 7 天后它在土壤中的总残留量分别为施药量的 71.8% 和 51.3%。不仅灭幼脲-III 号杀虫剂如此,从前面对杀虫双的研究中也可得到同样的结论。

2. 从各种因素对灭幼脲-III 号杀虫剂迁移与转化的影响中知道: 在本文中所研究的条件下,当土壤吸附性较强时,土壤初始含水率、降雨量等因素对农药运移的影响相对较小。

3. 灭幼脲-III 号杀虫剂在土壤中的淋溶性较差。在北方菜地土中其残留主要集中在地表附近 0—4cm 范围内,在封丘潮土中主要分布在 0—12cm 范围内。说明灭幼脲-III 号杀虫剂对地下水的潜在威胁较小。但由于其分布集中在地表层,通过地表土壤流失可能造成地表水体的污染。因此有必要对灭幼脲-III 号杀虫剂在地表水体中的迁移与转化规律进一步研究。

4. 如果在吸附性较差、透水性较强,且降解较慢的土壤中使用该杀虫剂也有可能构成对地下水的威胁。

5. 灭幼脲-III 号杀虫剂的降解比许多农药都快,它在土壤中的残留量较小。但是其降解产物是否对环境造成污染尚属未知,有必要对此作进一步研究。

参 考 文 献

- [1] 雷志栋、杨诗秀、谢森传, 1988: 土壤水动力学。清华大学出版社。
- [2] S. V. 帕坦卡(张政译,蒋章焰校), 1984: 传热与流体流动的数值计算。科学出版社。
- [3] Nielson D. R., Van Genuchten M. Th. et al., 1986: Water flow and solute transport processes in the unsaturated zone, *Water Resour. Res.* 22: 895—1085.
- [4] Wagnet R. J., et al., 1986: Predicting the fate of nonvolatle pesticides in the unsaturated zone. *J. Environ. Qual.*, 15: 315—322.
- [5] Carsel R. F., Mulkey L. A., et al., 1985: The pesticide root zone model (PRZM): A procedure for evaluating pesticide leaching threats to groundwater. *Ecol. Modelling*, 30: 49—69.

TRANSPORT OF PESTICIDE IN UNSATURATED SOIL AND ITS INFLUENCE FACTORS

Yang Dawen and Yang Shixiu

(*Dep. of Hydraulic and Electric Engineering, Qinghua University, 100084*)

Mo Hanhong

(*Research Centre of Eco-environment, Chinese Academy of Sciences*)

Summary

It is desirable to be able to estimate the fate of a pesticide applied to the agricultural fields. The widespread nature of pesticides contamination makes the problem difficult because it is not as a 'point source' that can be isolated and controlled. The fate is determined by a number of environmental processes, many of which operate in the unsaturated zone of soil. A mathematical simulation technique has been developed to evaluate pesticide leaching potential.

A model of the pesticide transport and transfer in the unsaturated soil is presented. The model is described according to the basic principles of water and solute movement under transient condition, in consideration of pesticide advection, diffusion, dispersion, sorption and degradation. A hybrid finite-differencing procedure provided substantial flexibility of initial and boundary conditions. The water conductivity and diffusion rate of the unsaturated soil sample were measured. The regularities of adsorption and degradation of CCU [1-(4-chlorophenyl)-3-(2-cholobenzoyl)urea] in the soil sample were studied by the experiments in laboratory. The model has been tested for CCU using data from the leaching experiments of soil columns in laboratory. The influence factors, such as initial soil water contents, rainfall, irrigation, pesticide adsorption and degradation were analyzed. The transport and transfer regularities of two kind of pesticides in the same soil under unsaturated condition were compared.

The results indicate that the leaching depth of CCU in both of the two kind soil was small, and CCU had a little threat to groundwater, but it could cause the pollution by the erosion of top soil. Adsorption and degradation had more influence than the other factors under the conditions in the study. Adsorption and degradation determine the transport and transfer in unsaturated soils.

The modeling approach can provide reliable and useful estimations of the pesticide transport and transfer in unsaturated soil. It also can be expanded to predict the fate of pesticide under field condition and to provide fundamental insights into the management processes.

Key words Pesticide, Transport and transfer, Mathematical simulation