

ICS 13.020.40

CCS Z 50

T/SSSC

中 国 土 壤 学 会 团 体 标 准

T/SSSC 015 —2025

基于地下水安全的 土壤 1,2,3-三氯丙烷安全阈值

Soil safety threshold of 1,2,3-Trichloropropane for groundwater safety

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.....	5
4 推导方法.....	5
5 土壤 1,2,3-三氯丙烷污染阈值	5
6 监测要求.....	6
附录 A 基于地下水安全的土壤 1,2,3-三氯丙烷安全阈值计算模型.....	7
参考文献.....	12

前 言

本文件按照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。

本文件中国土壤学会提出并归口。

本文件起草单位：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。

本文件主要起草人：王美娥、张雪云、马万凯、杨兆国、谢天、王一恒、陈卫平。

基于地下水安全的土壤 1,2,3-三氯丙烷安全阈值

1 范围

本标准规定了保护地下水安全的土壤1,2,3-三氯丙烷安全阈值及监测要求。

本标准适用于土壤1,2,3-三氯丙烷污染地下水风险评价。

本标准适用于土壤1,2,3-三氯丙烷浓度小于土壤饱和浓度。

本标准适用于长三角地区。

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/T 32722	土壤质量 土壤样品长期和短期保存指南
GB/T 36200	土壤质量 城市及工业场地土壤污染调查方法指南
GB36600	土壤环境质量 建设用地土壤污染风险管控标准（试行）
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和修复监测技术导则
HJ 25.3	建设用地土壤污染风险评估技术导则
HJ 25.4	建设用地土壤修复技术导则
HJ 610	环境影响技术评价导则 地下水环境
HJ J/T 164	地下水环境监测技术规范
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
T/SSSC 014-2025	基于地下水安全的土壤有机污染物安全阈值推导技术指 南
GB/T 6682	分析实验室用水规格和试验方法
HJ 605	土壤和沉积物 挥发性有机物的测定 吹扫捕集/气相色谱-质谱法

HJ 642	土壤和沉积物 挥发性有机物的测定 顶空/气相色谱-质谱法
HJ 735	土壤和沉积物 挥发性卤代烃的测定 吹扫捕集/气相色谱-质谱法
HJ 741	土壤和沉积物 挥发性有机物的测定 顶空/气相色谱法
HJ 736	土壤和沉积物 挥发性卤代烃的测定 顶空/气相色谱-质谱法

3 术语和定义

下列术语和定义适用于本标准。

3.1 地下水风险 Groundwater risks

土壤污染物通过包气带垂直淋溶过程进入地下水层导致地下水污染的概率，无量纲。

3.2 包气带衰减因子 (*AF*) 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。

3.3 地下水埋深 Groundwater depth

从地表到地下水潜水面或承压水面的垂直深度，米。

4 推导方法

土壤1,2,3-三氯丙烷的包气带衰减因子可按照土壤有机污染物包气带衰减因子估算技术指南（T/SSSC 014-2025）进行计算。采用Hydrus-1D模型计算包气带衰减因子，时间步长设为1天，模拟时间为10年。依据美国环境保护局发布的土壤污染修复目标—化学污染物致癌风险筛选值（EPA 2013）规定，本标准设定地下水中1,2,3-三氯丙烷的安全阈值为0.00075 μg/L，并以此推导土壤安全阈值。

5 土壤 1,2,3-三氯丙烷污染阈值

由于土壤污染物在包气带垂直运移过程中的浓度衰减系数与地下水埋深有关，本标准按照区域地下水埋深分段进行阈值分级，根据地下水风险，取每个地

下水埋深分段的土壤污染浓度分布的95%（HC₅）作为安全阈值。基于地下水安全的土壤中1,2,3-三氯丙烷安全阈值见表1。

表 1 基于地下水安全的土壤中 1,2,3-三氯丙烷安全阈值

单位：mg/kg

污染物项目	CAS 编号	地下水埋深（m）		
		0~2.0	2.0~4.0	4.0~9.0
1,2,3-三氯丙烷	96-18-4	0.02082	0.0296	>土壤饱和浓度

6 监测要求

6.1 调查监测

建设用地土壤及地下水环境调查与监测按GB/T 32722、GB/T 36200、HJ 25.1、HJ 25.2、GB 14148、HJ 164及相关技术规定要求执行。

6.2 分析方法

土壤污染物分析方法应按表2所列出分析方法的适用范围，选择适宜的测定方法。本文件发布实施后，国家发布新的监测分析方法标准，如适用性满足要求，同样适用于本文件相应污染物项目的测定。

表 2 土壤污染物分析方法

污染物项目	分析方法	标准编号
1,2,3-三氯丙烷	土壤和沉积物 挥发性有机物的测定 吹扫捕集/气相色谱-质谱法	HJ 605
	土壤和沉积物 挥发性有机物的测定 顶空/气相色谱-质谱法	HJ 642
	土壤和沉积物 挥发性卤代烃的测定 顶空/气相色谱-质谱法	HJ 736
	土壤和沉积物 挥发性卤代烃的测定 吹扫捕集/气相色谱-质谱法	HJ 735
	土壤和沉积物 挥发性有机物的测定 顶空/气相色谱法	HJ 741

附录 A 基于地下水安全的土壤 1,2,3-三氯丙烷安全阈值计算模型

A.1 模型框架

本技术方案构建了基于物理机制-数据驱动双耦合的基于地下水安全的土壤 1,2,3-三氯丙烷安全阈值计算模型体系，其技术流程包含：

多源异构数据标准化处理；

- (1) 土-水分配系数 (K_{sw}) 计算，参见附录A.2；
- (2) 基于Van Genuchten-Mualem方程的水动力参数反演，参见附录A.3；
- (3) 使用HYDRUS-1D模拟一维非饱和带溶质（1,2,3-三氯丙烷）运移，参见附录A.4；
- (4) 验证HYDRUS-1D模拟结果，参见附录A.5；
- (5) 包气带衰减因子 (AF) 计算，参见附录A.6；
- (6) 基于地下水安全的1,2,3-三氯丙烷安全阈值计算，参见附录A.7。

A.2 土-水分配系数 (K_{sw}) 计算方法及参数

A.2.1 计算公式

土-水分配系数 K_{sw} 按式 (A.1) 计算：

$$K_{sw} = \frac{\theta_{sw} + K_d \cdot \rho_b + H' \cdot \theta_{as}}{\rho_b} \quad (A.1)$$

式中：

K_d ：污染物固-液分配系数 (L/kg)，由式 (A.2) 计算；

ρ_b ：包气带土壤容重 (kg/L)，取值计算见表A.1；

θ_{sw} ：孔隙水体积比 (无量纲)，HJ 25.3推荐0.342；

θ_{as} ：孔隙空气体积比 (无量纲)，HJ 25.3推荐0.038；

H' ：亨利常数 (无量纲)，HJ 25.3推荐取值0.014。

污染物固-液分配系数 K_d 按式 (A.2) 计算：

$$K_d = K_{oc} \times f_{oc} \quad (A.2)$$

式中：

K_{oc} ：有机碳归一化分配系数 (L/kg)，(见表A.1)；

f_{oc} ：土壤有机碳含量 (%)，按实际检测值或区域数据库取值 (见表A.1)。

A.2.2 参数取值

表 A.1 土-水分配系数 (K_{sw}) 计算所需参数

参数	取值来源/方法
K_{oc}	EPI Suite™软件计算 (版本 4.11), 基于 1,2,3-三氯丙烷分子结构参数计算, 取值 93.27
ρ_b 、 f_{oc}	世界土壤数据库 (HWSD v2.0) 中 5 cm、15 cm、30 cm、60 cm、100 cm、200 cm 剖面土壤性质数据
θ_{sw} 、 θ_{as} 、 H'	按 HJ 25.3-2019 推荐值固定取值

A.3 Van Genuchten-Mualem 方程的水动力参数反演

A.3.1 计算公式

本标准采用Rosetta3模型反演非饱和导水率曲线, 基于Van Genuchten方程表征土壤水分特征, 公式如下:

$$K(\theta) = K_s \cdot S_e^l \cdot \left[1 - (1 - S_e^{1/m})^m \right]^2 \quad (\text{A.3})$$

$$\theta(h) = \begin{cases} \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{[1 + |\alpha \cdot h|^n]^m} \\ \theta_s \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

$$S_e = \frac{\theta(h) - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \quad (\text{A.5})$$

$$m = 1 - \frac{1}{n} \quad (\text{A.6})$$

式中:

$K(\theta)$: 土壤非饱和导水率 (cm/h);

K_s : 土壤饱和导水率 (cm/h);

h : 土壤基质势 (cm);

θ_s : 土壤饱和含水量 (cm^3/cm^3);

θ_r : 土壤残余含水量 (cm^3/cm^3);

α : 进气值的倒数 (1/cm);

n : 孔径分布指数 (无量纲);

l : 孔隙连续参数 (无量纲), 推荐值0.5。

A.3.2 参数反演

A.3.1中的 α 、 θ_s 、 θ_r 、 l 、 n 、 K_s 为构成Van Genuchten方程所需要的6个相互独立的参数。使用Soilgrids土壤数据经过Rosetta3模型计算6个参数的对应值。

A.4 HYDRUS-1D 模拟一维非饱和带溶质运移方法

A.4.1 Richards方程

HYDRUS-1D在局部饱和介质中，采用Richards方程来描述水流在土体内的运移。Z方向Richards方程公式如下：

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(\theta) \cdot \frac{\partial H}{\partial z} \right] - S \quad (\text{A.7})$$

式中：

θ ：单位体积土壤的含水量（ cm^3/cm^3 ）；

$K(\theta)$ ：土壤非饱和导水率（ cm/h ），参见公式A.3；

H ：土壤水势（ cm ）；

S ：其他汇项（ $\text{cm}^3/(\text{cm}^3 \cdot \text{hr})$ ）。

A.4.2 HYDRUS-1D模型参数设置

- (1) 模块选择：Water Flow模块、Solute Transport模块；
- (2) 时间设置：时间步长1天，模拟周期10年；
- (3) 初始条件：根据测量数据，设置土壤表层初始浓度 c_0 （ mg/L ）；
- (4) 水流模拟参数：采用Richards方程，选择Van Genuchten模型，参数见附录A.3；
- (5) 溶质模拟参数：包括土壤参数与溶质参数（参见表A.2）；
- (6) 边界条件设置：
 - 1) 水流模拟边界：上边界为大气通量（降雨-蒸散）边界，下边界为自由排水边界；
 - 2) 溶质运移模拟边界：上边界为挥发性溶质停滞边界，下边界为零浓度梯度边界；
- (7) 气象数据设置：
 - 1) 降水数据：逐日降水量（ dm/day ）；
 - 2) 温度数据：上边界温度（ degC ）、下边界温度（ degC ）；
 - 3) 日照参数：纬度（ deg ）、海拔（ m ）。

表 A.2 HYDRUS-1D 模型溶质模拟参数

参数类型	参数	取值来源/方法
土壤参数	土壤容重 ρ_b	参见表 A.1
	纵向弥散度	实验室测量
溶质参数	自由水中的分子扩散系数	实验室测量
	土壤空气中的分子扩散系数	实验室测量
	污染物固-液分配系数 K_d	参见公式 A.2
	亨利常数 H'	参见表 A.1

A.4.3 HYDRUS-1D模型模拟结果

从HYDRUS-1D模型模拟结果中提取潜水层处浓度 c_1 (mg/L)。

A.5 HYDRUS-1D 模拟结果验证方法

A.5.1 平均绝对误差MAE

平均绝对误差MAE用于衡量预测值与真实值之间的平均绝对偏差，对异常值不敏感。公式如下：

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (\text{A. 8})$$

式中， y_i 是实际值， \hat{y}_i 是模拟值。

平均绝对误差MAE的取值范围 $[0, +\infty]$ ，值越小越好。

A.5.2 均方根误差RMSE

均方根误差RMSE用于衡量预测值与真实值之间的均方根偏差，对误差较为敏感。公式如下：

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (\text{A. 9})$$

式中， y_i 是实际值， \hat{y}_i 是模拟值。

均方根误差RMSE的取值范围 $[0, +\infty]$ ，值越小越好。

A.5.3 决定系数 R^2

决定系数 R^2 用于衡量模型对数据变异的解释能力，即模型拟合优度。公式如下：

$$R^2 = 1 - \frac{(y_i - \hat{y}_i)^2}{(y_i - \bar{y})^2} \quad (\text{A.10})$$

式中， y_i 是实际值， \hat{y}_i 是模拟值， \bar{y} 是实际值的均值。

决定系数 R^2 的取值范围理论上为 $[-\infty, 1]$ ，实际通常在 $[0,1]$ 之间，值越接近1越好。

A.5.4 方差解释度EV

方差解释度EV用于衡量模型解释目标变量方差的比例。公式如下：

$$EV = 1 - \frac{Var(y_i - \hat{y}_i)}{y_i} \quad (\text{A.11})$$

式中， y_i 是实际值， \hat{y}_i 是模拟值， Var 表示方差。

方差解释度EV的取值范围 $[0,1]$ ，值越接近1越好。

A.6 包气带衰减因子（AF）计算方法

包气带衰减因子（AF）计算公式如下：

$$AF = \frac{c_e}{c_d} \quad (\text{A.12})$$

式中：

AF：污染物在包气带的衰减因子，无量纲；

c_e ：土壤表层孔隙水中有机污染物的浓度（mg/kg）；

c_d ：包气带下层土壤溶液中有机污染物的浓度（mg/kg）。

A.7 基于地下水安全的土壤污染阈值计算方法

基于地下水安全的土壤污染阈值计算公式如下：

$$C_{RSL} = K_{sw} \times AF \times DF \times MCL \quad (\text{A.13})$$

式中：

C_{RSL} ：基于保护地下水的土壤污染阈值（mg/kg）；

K_{sw} ：土-水分配系数（无量纲），参见附录A.2；

AF：污染物在包气带的折减系数（无量纲），参见附录A.6；

DF：潜水层污染物进入地下水的稀释因子（无量纲），EPA推荐值20；

MCL：污染地下水质量标准（mg/L），本标设定值 $7.5e-7$ mg/L。

参考文献

[1] US EPA., Regional Screening Levels (RSLs) for Chemical Contaminants. Summary Table. 2024.

[2] US EPA., Risk Assessment Guidance for Superfund: Volume 1-Human Health Evaluation Manual (Part B, Development of Risk-based Preliminary Remediation Goals) Interim. 1991.

[3] Poggio, L., et al., SoilGrids 2.0: producing soil information for the globe with quantified spatial uncertainty. SOIL, 2021. 7(1): p. 217-240.

[4] Peng, S., et al., 1 km monthly temperature and precipitation dataset for China from 1901 to 2017. Earth System Science Data, 2019. 11: p. 1931–1946.

[5] Peng, S., et al., Spatiotemporal change and trend analysis of potential evapotranspiration over the Loess Plateau of China during 2011-2100. Agricultural and Forest Meteorology, 2017. 233: p. 183-194.

[6] 朱治林, et al., 中国生态系统研究网络. 2005~2014年CERN地下水位数据集. 2020, 国家生态科学数据中心.