

China-PEARL 模型操作手册

前言

农业中农药的使用会对自然环境产生一系列的危害风险，如农药可淋溶至地下水、暴露于水体中对水生生态系统产生影响以及挥发到空气中。China-PEARL 模型是一个数学模型，它可以预测中国北方旱田地下水场景中农药淋溶至地下水的浓度。

《China-PEARL模型操作手册》（以下简称《手册》）是China-PEARL模型的用户界面操作手册，共8个章节，包含模型的背景信息和数据库简介，在正文部分将对模型界面进行介绍。《手册》是针对China-PEARL模型的第一本用户使用手册，适用的模型版本为CHINAPEARL_1_1_1。旨在为相关科研和管理人员、各相关生产企业和其他组织/个人提供技术支持。由于时间和经验所限，在编制过程中难免有不足之处，敬请广大读者批评指正。

；

编写组
2014年11月

China-PEARL 模型原理简介

在China-PEARL模型中,对土壤-植物体系中水流和热传导的模拟是通过SWAP模型(Soil Water Atmosphere Plant, 土壤水大气植物模型)模拟的。SWAP模型是一种水文学模型,与农药模型China-PEARL有机结合在一起。土壤中的水流通过Darcy方程来描述。降雨、灌溉等因素已纳入模型中。此外,模型还模拟了土壤中水的蒸发、植物根系对水的吸收以及植物对水的传导(图1.1)。

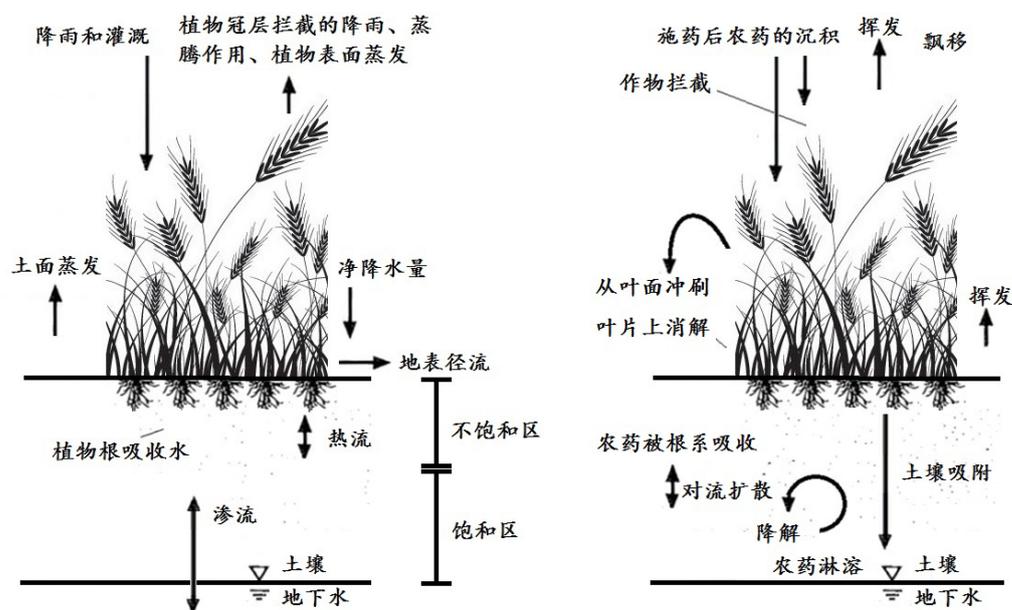


图1.1 China-PEARL模型中的水文学概念和模拟的农药环境行为

China-PEARL模型可以模拟不同的农药施药方式,如叶面喷雾、土壤表面喷雾,土壤处理,土壤注射等。对于植物叶面喷雾,模型还可模拟农药在作物表面的挥发、渗透、(光)转化以及雨水冲刷等过程。

农药在土壤中的吸附由Freundlich 吸附方程描述。在土壤中主要包括平衡吸附和非平衡吸附过程。农药在土壤水相中的迁移包括对流和扩散过程。同时,模型也模拟了农药在气相的对流以及农药从土壤表面的挥发过程。农药通过植物根系吸水并通过蒸腾作用进入植物体。对于农药降解行为,不同的降解机制不同转化率的降解产物。化合物的转化反应服从一级反应动力学。根据Arrhenius公式,土壤中农药的转化主要受土壤温度影响,降解形式主要是好氧降解,同时模型考虑到土壤湿度条件和土壤深度也会对农药的土壤降解造成影响。

中国气候多样、土壤类型复杂、地形多变,这决定了中国不同地区具有独特的种植制度与农业结构。农药使用所造成的环境风险很大程度上受到诸如气候、土壤和地形。考虑到这些差异对农药环境风险评估的影响,将中国划分为6个场景区。每个场景区分别建立了若干场景点来代表农药使用对环境产生风险的真实的最糟糕的情况。

从总体上看，根据年平均降雨和年平均温度，中国被分为6个场景区，如图1.2所示。东北场景区、西北场景区和华北场景区是旱作场景区，但是旱作中不包含森林和草场。

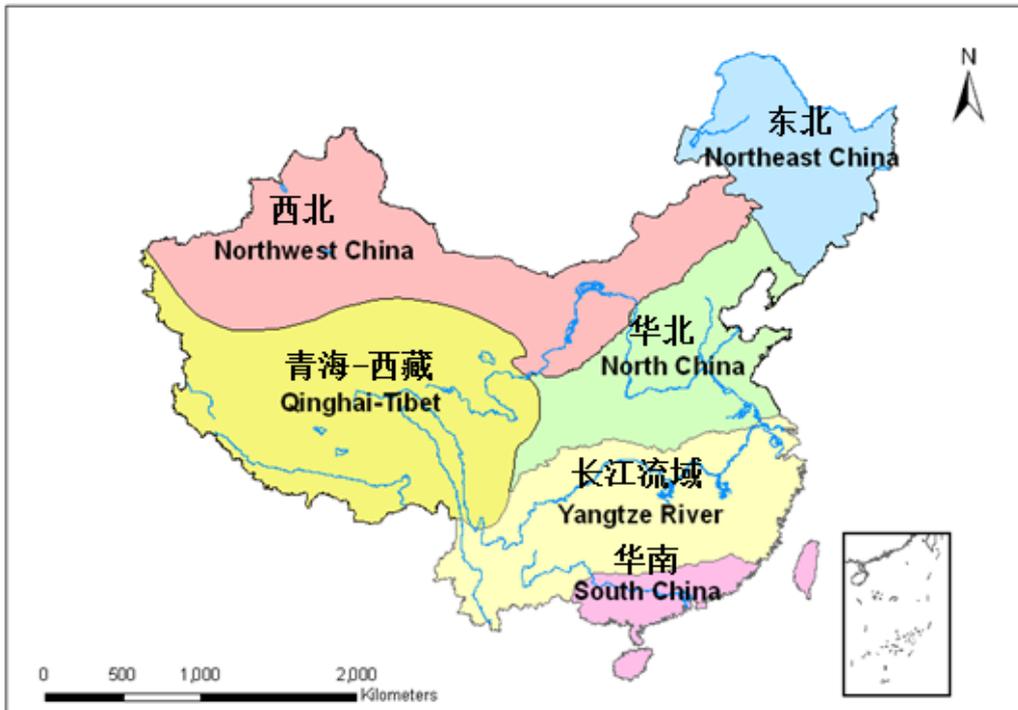


图1.2 中国不同场景区

场景点应当代表所有地下水第99百分位的情况（这一百分位数通常可以代表现实中最糟糕的情况）。对于地下水场景，我们定义由第90百分位的土壤性质和第90百分位的降雨量叠加得到第99百分位的所有地下水的可能情况。用多年气象数据模拟第90百分位的气象条件。在场景设计中，由于土壤有机质含量是土壤性质中影响农药淋溶的主要因素，所有用第10百分位的土壤有机质含量代表第90百分位的土壤性质。

在三个北方旱作场景区，根据第10百分位的土壤有机质含量和第90百分位的平均降雨，选择出六个场景点（图1.3和表1.1）。

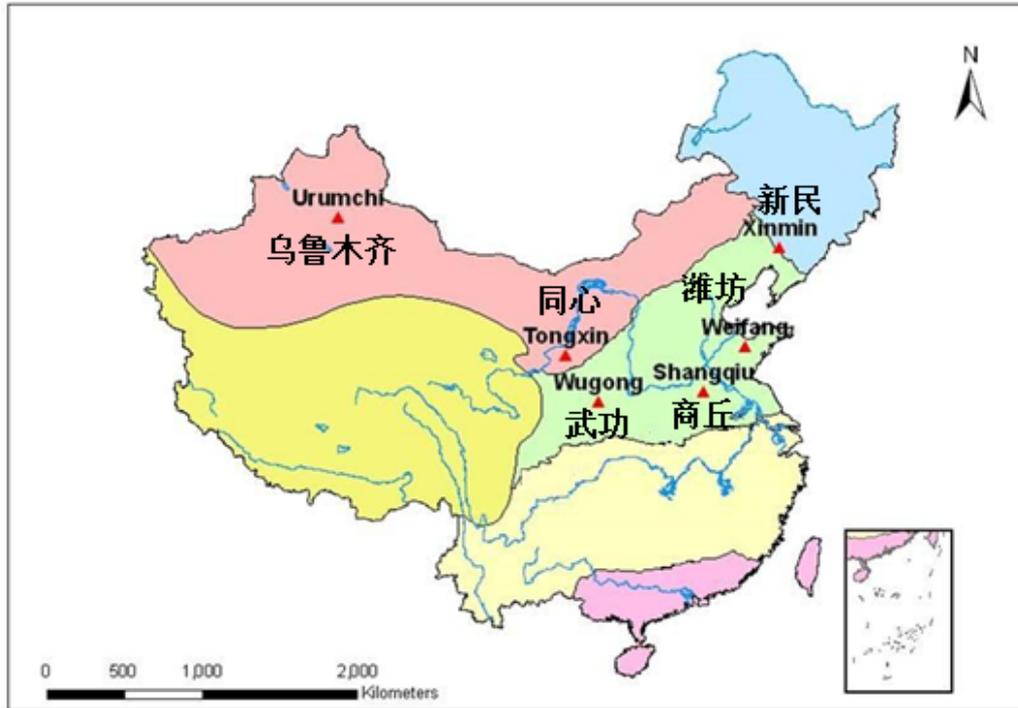


图1.3 东北场景区、西北场景区和华北场景区旱作农业地下水场景场景点

表 1.1 东北场景区、西北场景区和华北场景区旱作农业地下水场景场景点

场景区	场景点名称	所在省	年平均降雨 (mm)	年平均温度(°C)	有机质含量分类 (%)
东北地区	新民	辽宁	571.7	8.65	1 - 2
西北地区	乌鲁木齐	新疆	252.4	6.73	0.6 - 1
	同心	宁夏	270.2	8.87	0.6 - 1
华北地区	潍坊	山东	599.1	12.40	0.6 - 1
	商丘	河南	654.7	14.09	0.6 - 1
	武功	陕西	590.2	13.21	0.6 - 1

目录

China-PEARL模型用户操作指南	1
1 模型界面	1
1.1 China-PEARL 用户界面的常规属性	1
1.2 项目界面	3
1.3 主界面	3
2 模型计算流程	4
2.1 运行向导	4
2.2 运行China-PEARL	4
2.3 查看结果	5
3 运行向导 (Runs Wizard)	5
4 运行模型	7
5 创制图表	7
6 编辑化合物信息	8
6.1 常规General选项卡	8
6.2 Freundlich土壤吸附选项卡	9
6.3 土壤中转化选项卡	10
6.4 扩散选项卡	11
6.5 作物选项卡	12
6.6 农药母体-代谢物	13
7 创建化合物信息	13
8 编辑农药施药信息	16
9 创建农药施药信息	18
10 China-PEARL模型安装	22
10.1 安装Interbase 6.5	22
10.2 安装China-PEARL	26
附件 1: 暴露评估案例	35
附件 2: China-PEARL模型的输入参数和输出值 (表 2-1)	42
参考文献	47

China-PEARL模型用户操作指南

本部分将对China-PEARL模型用户操作界面进行总体介绍。该操作界面整合了数据存储、数据检索、模型控制和查看输出结果四部分功能(图1)。用户可以在Windows XP/VISTA/7/8上运行China-PEARL模型。用户操作界面与数据库相连,便于数据访问。用户界面生成的China-PEARL模型输入文件,并调用模型。简要的输出结果会调回China-PEARL数据库,可以在用户界面访问。China-PEARL模型系统有些复杂,但是通过使用China-PEARL的用户界面,用户将不再需要亲自协调模型系统内各部分之间的关系。模型使用界面将使用户的操作更加便捷。

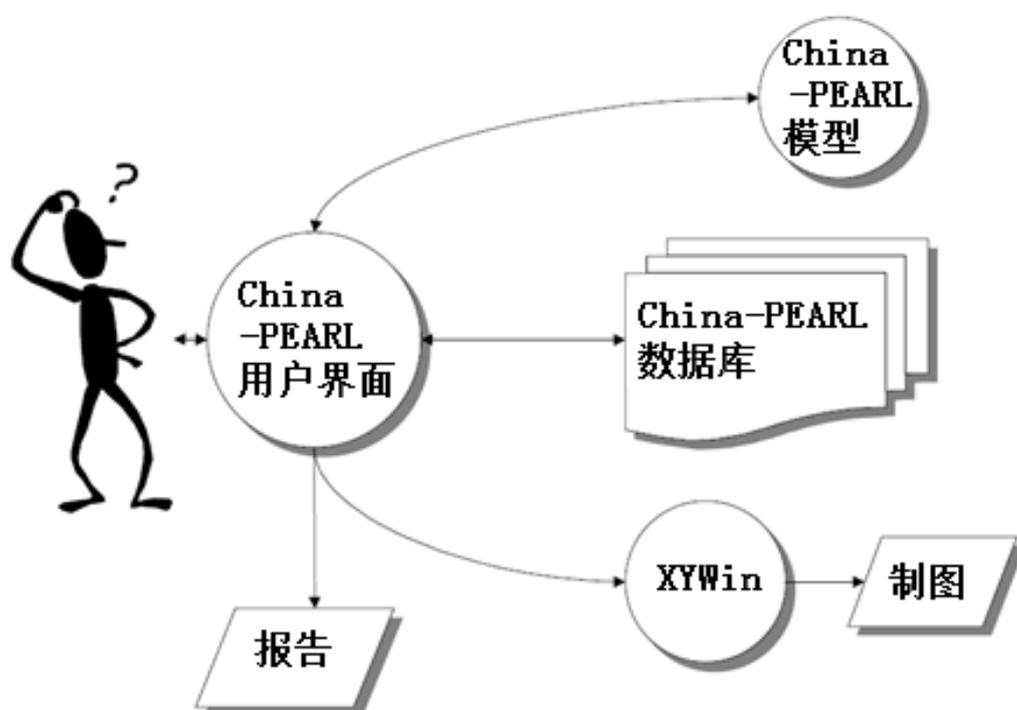


图1 China-PEARL模型系统操作原理概览

1 模型界面

1.1 China-PEARL 用户界面的常规属性

China-PEARL模型用户界面的所有界面都有一个相似的设置,本手册将会用化合物编辑界面作为例子来对其加以解释。正如你所看到的,界面由两部分组成:

- (1) 浏览框,
- (2) 编辑框。

Code	Name	Parent	Molar Mass
▶ A	Substance A	Yes	300
B	Substance B	Yes	300
C	Substance C	Yes	200
D	Substance D	Yes	300
MET-C	Metabolite of Substance C	No	150
No	No substance	Yes	200

Copy Transformation Scheme...

图2 浏览框

浏览框允许用户滚动鼠标浏览所有记录（在此指化合物）。您将注意到随着用户滚动浏览框，编辑框中信息也随之变化。所有浏览框都配有导航区：

◀	到达表中的第一条记录
▶	到达表中的最后一条记录
+	添加一条新（空白）记录
-	删除记录
✓	确认修改并保存
✗	取消修改
Copy	拷贝记录

General Freundlich sorption Transformation Diffusion Crop

Option: Kom, pH-independent

Equilibrium sorption

pH - independent

Kom (coef. for sorption on org. matter (L kg-1): measured at (C):

Molar enthalpy of sorption (kJ mol-1):

Equilibrium sorption

Reference concentration in liquid phase (mg L-1):

Freundlich sorption exponent (-):

Non-equilibrium sorption

Desorption rate coefficient (d-1):

Factor relating CoffreNeq and CoffreEq (-):

图3 编辑框

在界面的这一部分用户可以编辑当前在浏览框中选中的记录。

1.2 项目界面

从主界面可以到达项目界面（Projects）。项目界面允许用户组织数据。已经存在的项目可以在浏览框中被选中。导航区运行用户创建或者删除项目。在编辑区可以对项目添加适合的描述。

1.3 主界面

该界面是模型界面的中心部分，用户可以从主界面到达任意想到达的不同界面，用以编辑数据库、运行条目以及查看评估报告。用户可以使用按钮来浏览用户界面。

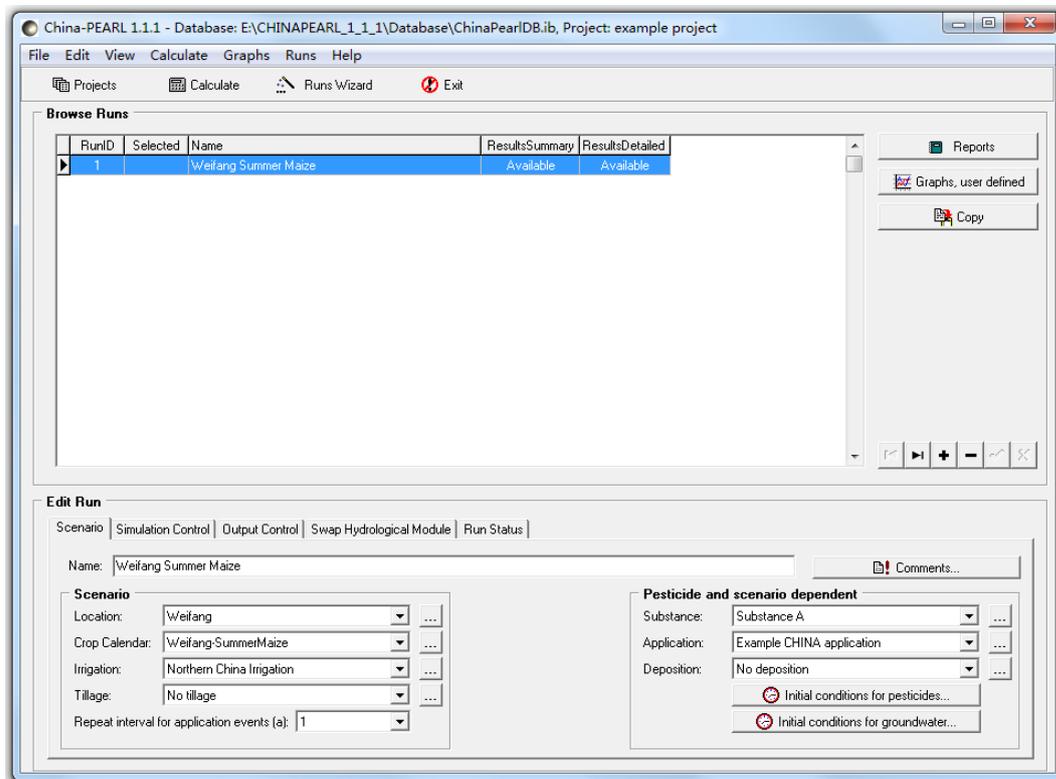


图4 China-PEARL用户界面主界面

2 模型计算流程

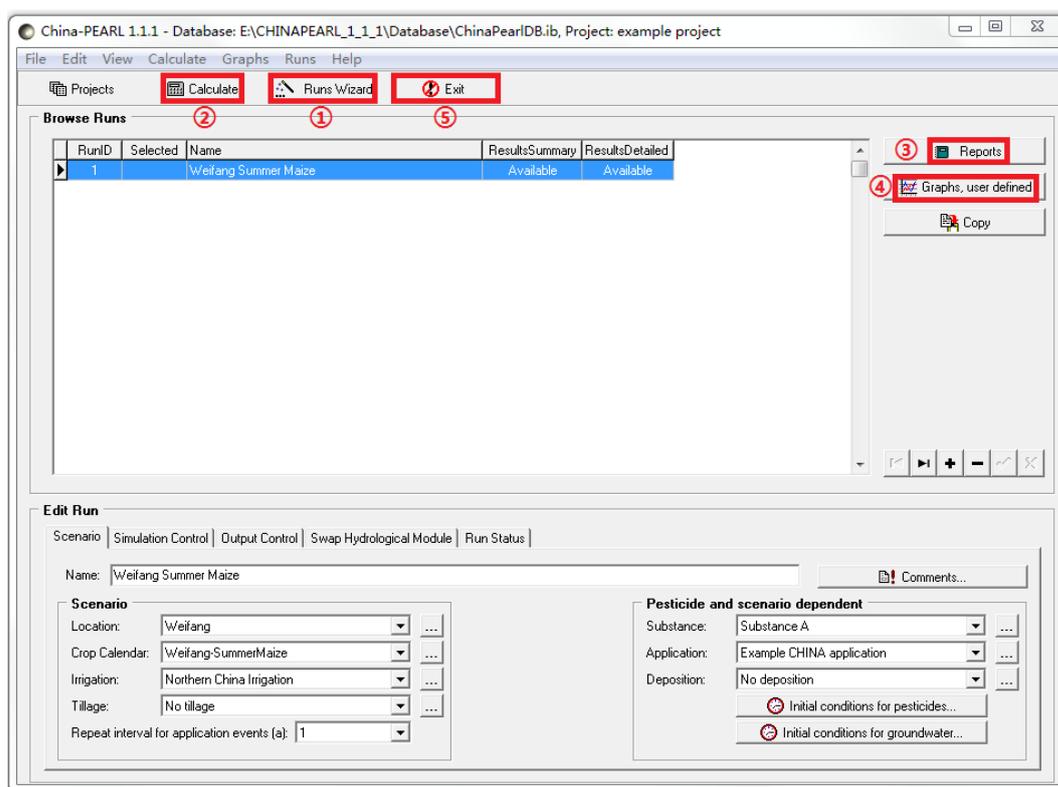


图 5 生成运行条目的过程

- ① 使用运行向导（Runs Wizard）设置模型拟计算的作物（Crop）、场景（Location）、化合物（Substance）、施药信息（Application scheme）、所属项目（Project）等信息；
- ② 点击“Calculate”按钮；
- ③ 等模型计算完成后，点击“Reports”按钮查看报告；
- ④ 点击“Graphs, user defined”按钮查看图形；
- ⑤ 点击“Exit”按钮退出模型界面。

2.1 运行向导

按运行向导（Runs Wizard）按钮，生成一个或多个运行条目（Run）

1. 选择一种或多种作物类型，并按下一页
2. 选择一个或多个场景点，并按下一页
3. 选择一种化合物，一个施药信息，一个长期施药信息（重复施药间隔，可以为间隔一年，两年或三年）
4. 注意，对所有运行条目，您只能选择一个施药信息和一种化合物。
5. 按完成按钮，设置新的运行条目存放的项目ID。

2.2 运行 China-PEARL

点击计算（Calculate）按钮，运行模型。

1. 所用被选择的运行将被执行
2. China-PEARL用户界面将写入输入文件并且调用模拟计算内核

3. 用户可以追踪模拟进程

当完成所有运行，用户可以看见“结果小结（Results Summary）”和“结果详情（Results Detailed）”的状态条变为“可用（Available）”。

1. 如果有错误出现，“结果小结（Results Summary）”和“结果详情（Results Detailed）”的状态条变为“报错（Error）”
2. 错误可以在主表格的运行状态（Run Status）选项卡中复查。

2.3 查看结果

点击报告（Reports）按钮，查看总结报告。请关注第90百分位的农药淋溶浓度（The average concentration of XXX closest to the 90th percentile）（代表整体第99百分位脆弱性的地下水场景）。

点击“图表，用户定义（Graphs, user defined）”按钮，查看图表。

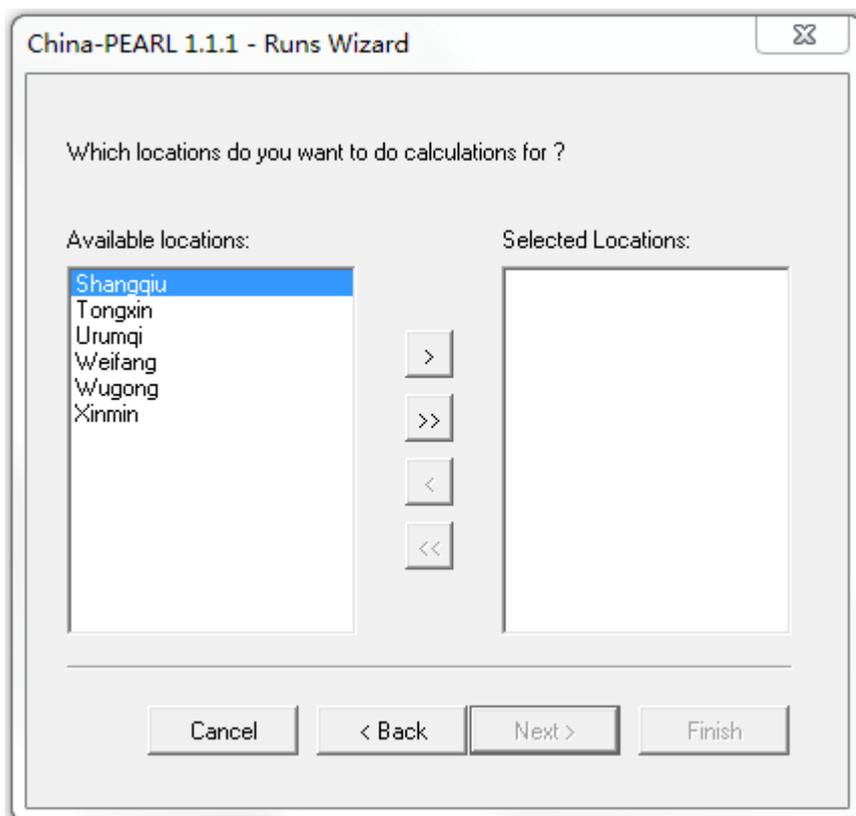
3 运行向导（Runs Wizard）

单击主界面上方的运行向导(Runs Wizard)按钮可以进入编辑状态。指导您完成以下步骤：

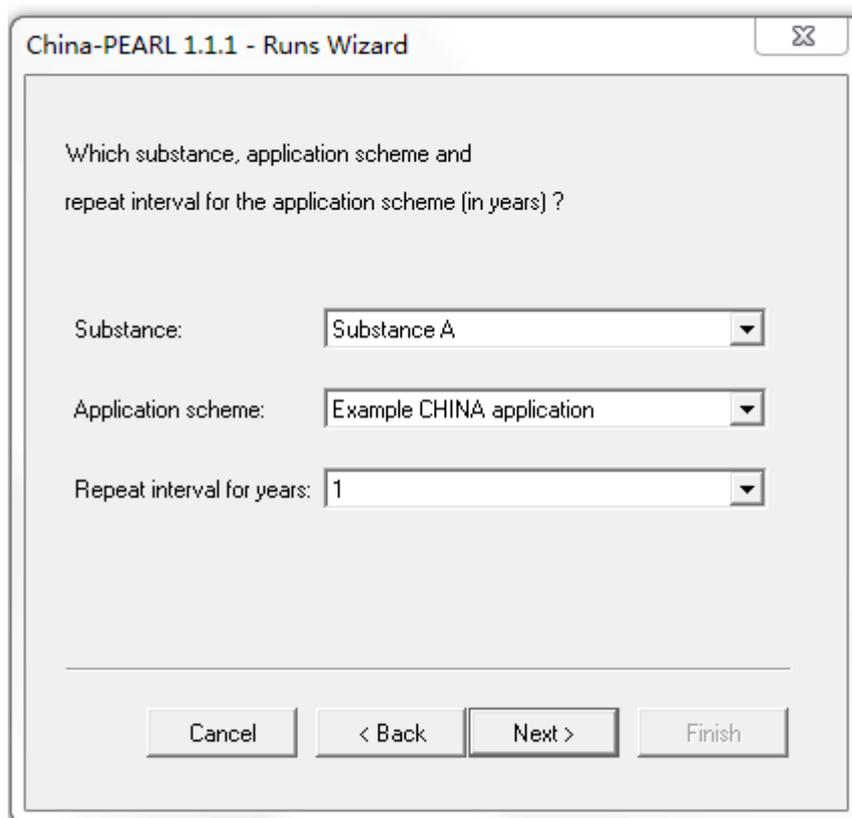
1. 选择作物crop(s)



2. 选择场景点location(s)



3. 选择化合物substance，在这里只能选择母体化合物。
4. 选择施药信息（application scheme）。
5. 选择施药信息（application scheme）的重复间隔（每年都施药，还是每间隔一年施药，还是每间隔两年施药）



注意，在运行向导中，您只能从已经存在的部件中选择。如果您想使用一个新的化合物或新的农药施药信息来运行China-PEARL模型，您必须在操作运行向导之前，创建新的化合物信息或新的理化性质信息。

您不能编辑作物和场景点。同样，模型模拟的时域也是固定的，这取决于施药信息的重复间隔。在运行向导运行结束后，用户界面已经创建了一个新的条目（Runs）。您将看到左下方的作物和场景编辑部分变为灰色的非激活状态。。

单个运行条目的施药信息（application schemes）是用户在运行向导中明确的施药信息（application schemes）。在新建立的项目中的所用运行条目已经被选定将执行。用户可以按计算（Calculate）按钮，运行模型。当完成后，用户可以创建图表并查看报告。

4 运行模型

当准备好了编辑模型输入和定义所需输出变量的，用户可以开始运行模型。China-PEARL模型界面可以执行多个运行条目，所以您不用等到第一运行结束再开始第二个运行。

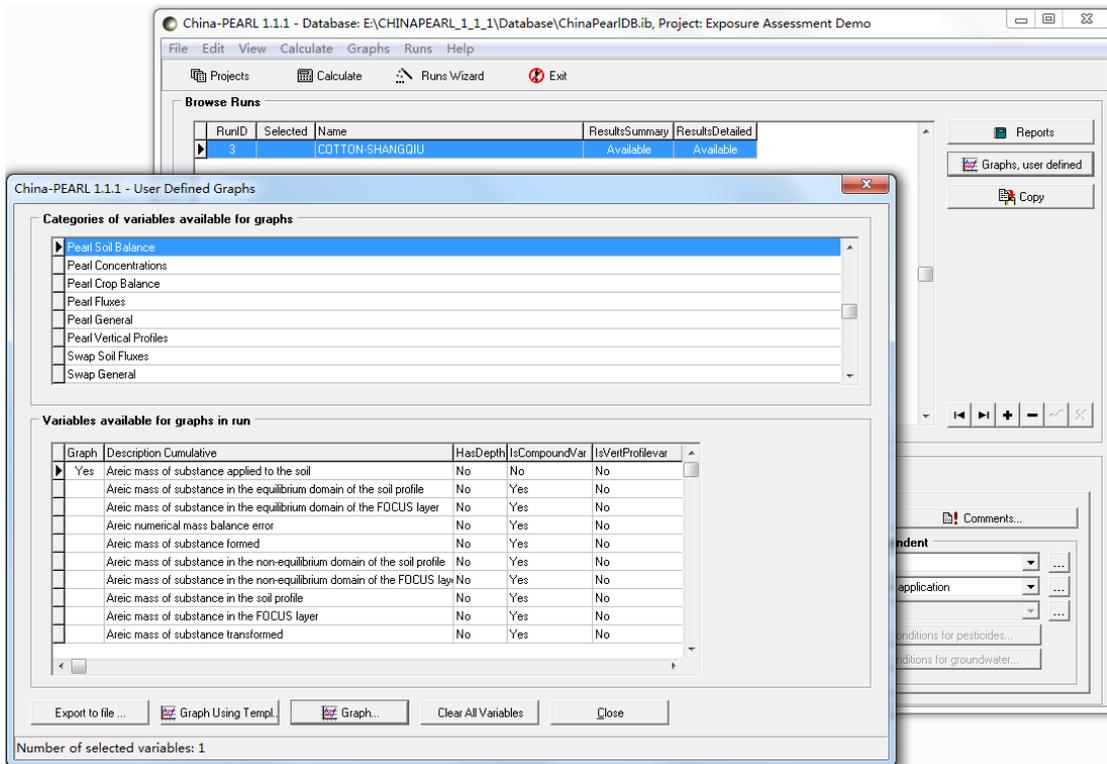
为了执行模型运算，首先打开主界面。如果当前主界面上显示的不是用户所要运行的项目，需要打开项目界面加以选择。现在双击所有需要运行的评估条目。用户此时可以看到“已选”提示行变为“Yes”。当所有需要执行的条目都被选中之后，用户可以点击“计算（Calculate）”按钮来执行运算。当第一次执行条目时，China-PEARL模型界面将生成气象和灌溉数据文件。这需要花些时间。而每次模型计算都会生成China-PEARL的输入文件。

稍后，您将看到一个带有China-PEARL模拟内核图标的控制台窗口。您可以在该窗口中的追踪模拟进程。您可以同时按下Ctrl-C来中断模型执行。实际计算时间取决于在土壤剖面中数值计算的数量(Leistra等, 2000)。

5 创制图表

在模型运算完成后，输出结果可以通过China-PEARL模型界面的图表生成功能分析运算结果。在China-PEARL模型中，用户可以创建自己的图表。China-PEARL模型可以为所有模型运行条目创建图表。从主界面可以进入用户图表界面。请按以下步骤创建图表：

- 从上框中选择一种类别
 - 在下框中通过双击变量名来选择一个或多个变量。
- 设置好后，单击‘Graph’按钮。



6 编辑化合物信息

6.1 常规 General 选项卡

在这一选项卡中，用户可以填写化合物的基本理化性质参数。化合物代码以及化合物名称必须填写。化合物代码的最长字段为5个字符。接下来是化合物的摩尔质量。China-PEARL模型还需填写饱和蒸汽压，并且定义测量温度；摩尔蒸发焓；农药水中溶解度，并且定义测量温度；摩尔溶解焓。



图6 化合物界面

6.2 Freundlich 土壤吸附选项卡

化合物的吸附过程通过Freundlich 吸附公式描述。土壤吸附选项卡由三部分组成：

- 第一部分包含描述土壤Freundlich吸附系数的参数
- 第二部分包含参考浓度以及土壤指数
- 第三部分将描述非平衡吸附。



图7 化合物菜单上的Freundlich吸附选项卡

在土壤吸附选项卡，需指定China-PEARL模型可用来模拟土壤吸附的系数。最常用的系数（‘Kom, pH-independent’）是计算从土壤有机质含量和土壤有机质吸附系数来计算土壤吸附系数。如果选择‘Kom, pH-dependent’，土壤吸附系数将使用另一公式计算。这一公式适合于弱酸性吸附。如果农药的吸附依赖于其他土壤性质而非土壤有机质含量（例如，氧化物含量或者粘土含量），那么土壤吸附系数可以直接采用。在这时，需要选择‘Kf, user defined’。如果选择‘Kom, pH-independent’，只需要再填入一项参数，即土壤有机质吸附系数 $K_{om,eq}$ 。如果选择‘Kom, pH-dependent’，必须填写两种土壤有机质吸附系数，即酸性值($K_{om,eq,ac}$)和碱性值($K_{om,eq,ba}$)。此外，解离常数(pKa)的负对数以及pH校正系数也需要填写。如果选择‘Kf, user defined’，用户需指定表层土壤中测定的土壤Freundlich吸附系数。

6.3 土壤中转化选项卡

在此选项卡中，用户必须指定能够影响化合物在土壤中转化率的参数。好氧条件下的土壤降解半衰期必须填入。在试验中由于温度反映了试验条件所以必须指明。此外，用户还需要指明试验是否是在适合植物生长的最佳土壤湿度环境（optimum moisture conditions）进行。适合植物生长的最佳土壤湿度环境（optimum moisture conditions）是指比田间土壤持水量更加湿润的条件（例如比pF 2更加湿润）。如果土壤降解试验是在土壤湿度低于田间土壤持水量（例

比如 pF 2更加干燥)的条件下进行,那么最佳土壤湿度环境(optimum moisture conditions)选项将不会勾选,而且用户需要自行指定土壤降解试验所在的土壤湿度条件。温度对农药土壤降解率的影响是通过Arrhenius公式描述;摩尔活化能也需要用户指定。土壤中含水量对降解率的影响是通过文献报道的公式进行模拟(Walker, 1974),这个公式要求输入液体影响指数(Exponent for the effect of liquid)。不同土壤深度对降解率的影响假定属于土壤性质范畴,需要在土壤界面中设定。

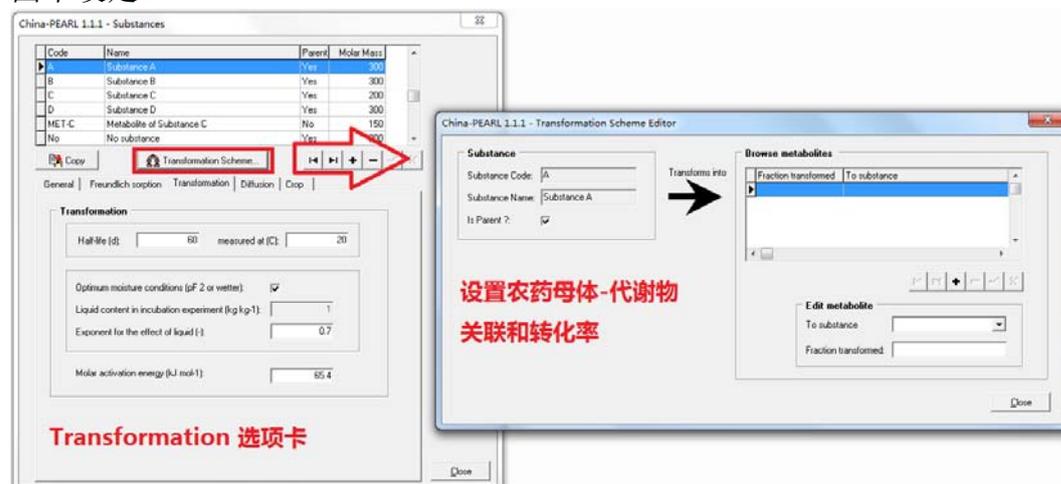


图8 化合物菜单上的Transformation选项卡

6.4 扩散选项卡

农药在纯水中和在空气中的扩散系数是化合物的属性,并且必须在扩散选项卡中指定。相对扩散系数参数在土壤界面中标明。扩散系数与温度有关。用户可以明确一个基准温度,这个可以用于在空气中的扩散系数和在纯水中的扩散系数。

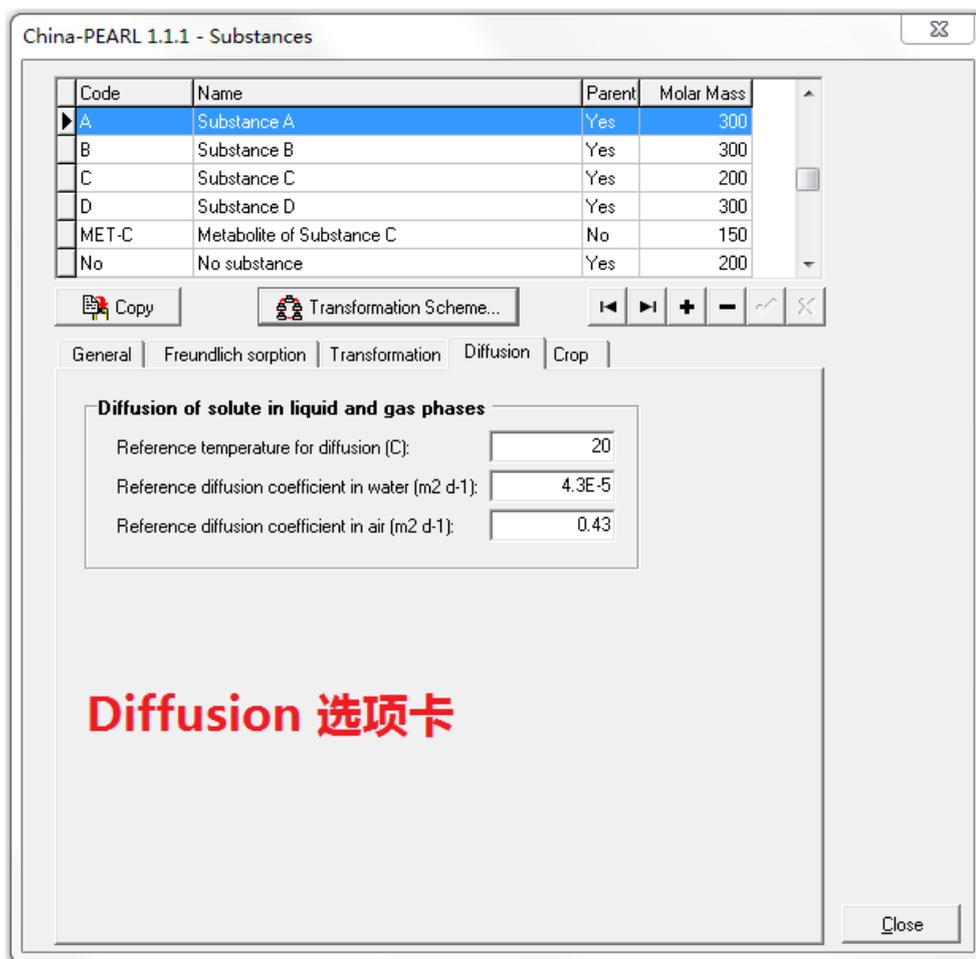


图9 化合物菜单上的Diffusion选项卡

6.5 作物选项卡

China-PEARL模型可以模拟农药在作物叶片上的行为以及模拟农药被作物根系吸收的过程。所有这些过程都在作物选项卡中有所体现。正如在农药代谢物界面（图9）只考虑农药在土壤中的行为一样，作物叶片上也只考虑了农药母体的行为。农药母体在作物叶片上的行为包括挥发、渗透到植物体内和（光化学）降解。这些过程被描述为一级动力学反应。用户可以选择作物叶面视为等同的描述（Lumped）或者作物叶片消解的具体描述（作物叶面行为组合框）。如果用户选定“Specified”，那么用户需要分别指定在叶面渗透、降解和挥发的半衰期。如果用户选择“Lumped”，那么只需输入一个整体的半衰期。农药叶面冲刷通过一个零级方程式描述，需要填写叶面冲刷因子。而对于根系吸收农药的方程式，只有根系吸收系数一项需要填写。

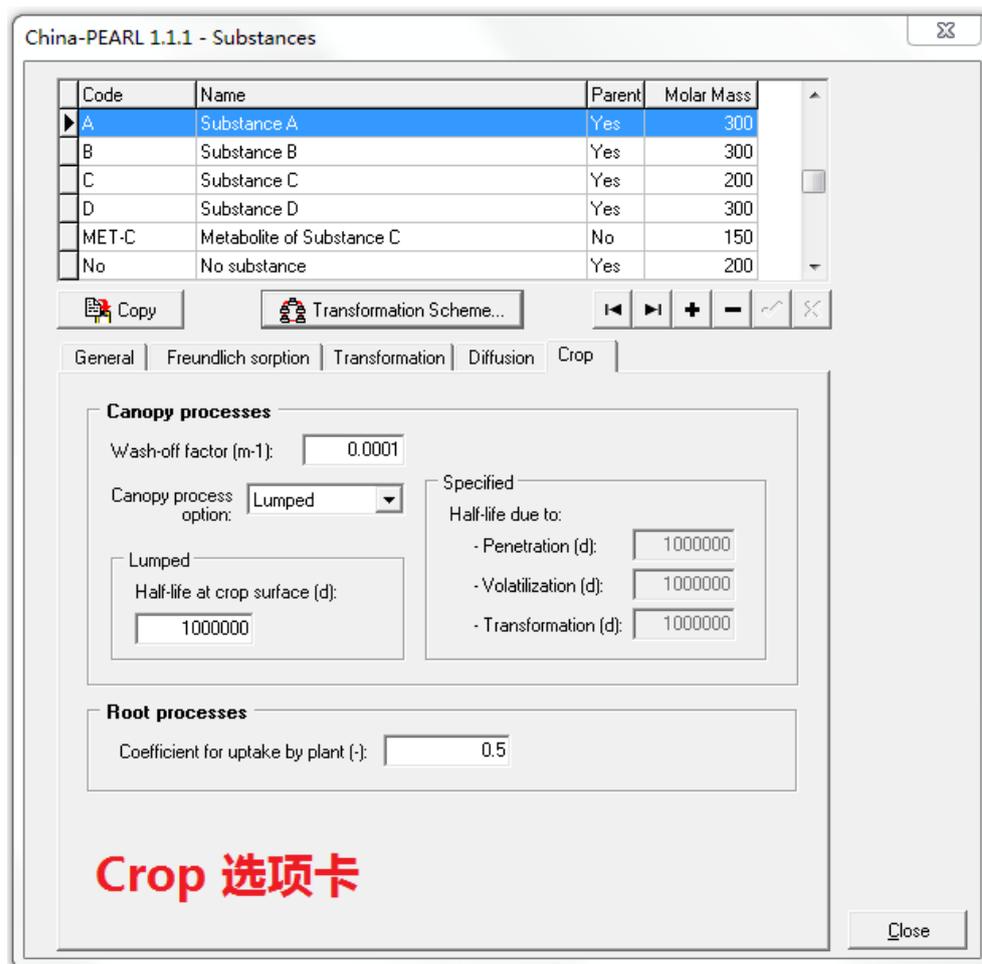


图10化合物菜单上的Crop选项卡

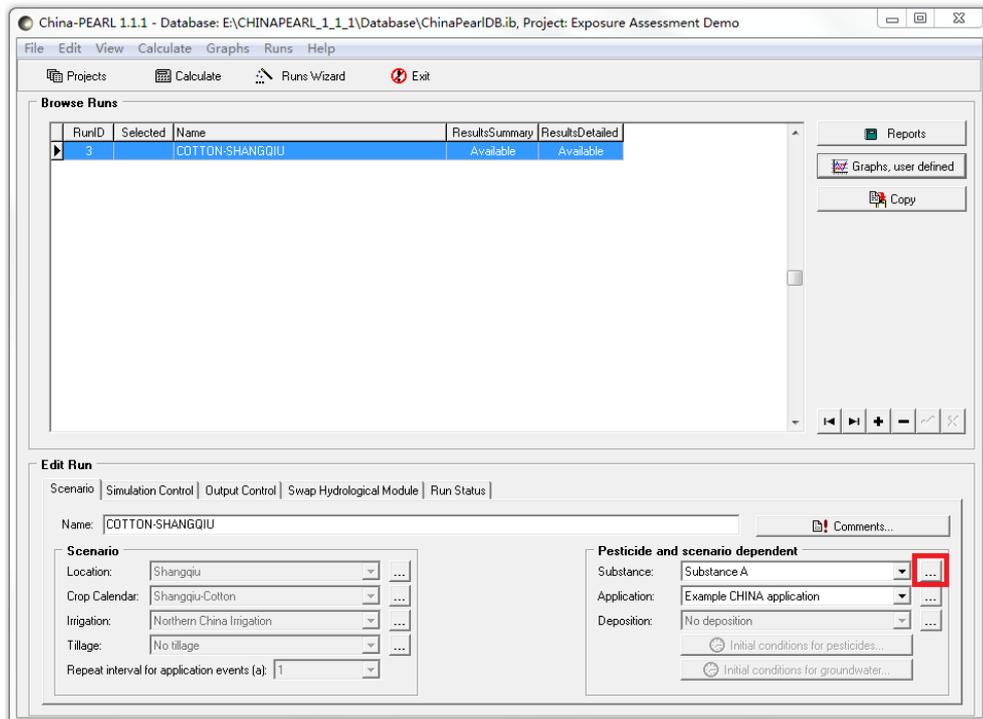
6.6 农药母体-代谢物

如果农药在土壤中的相关代谢产物有转化率数据、土壤吸附系数和土壤好氧降解半衰期，可对其评估地下水淋溶浓度。

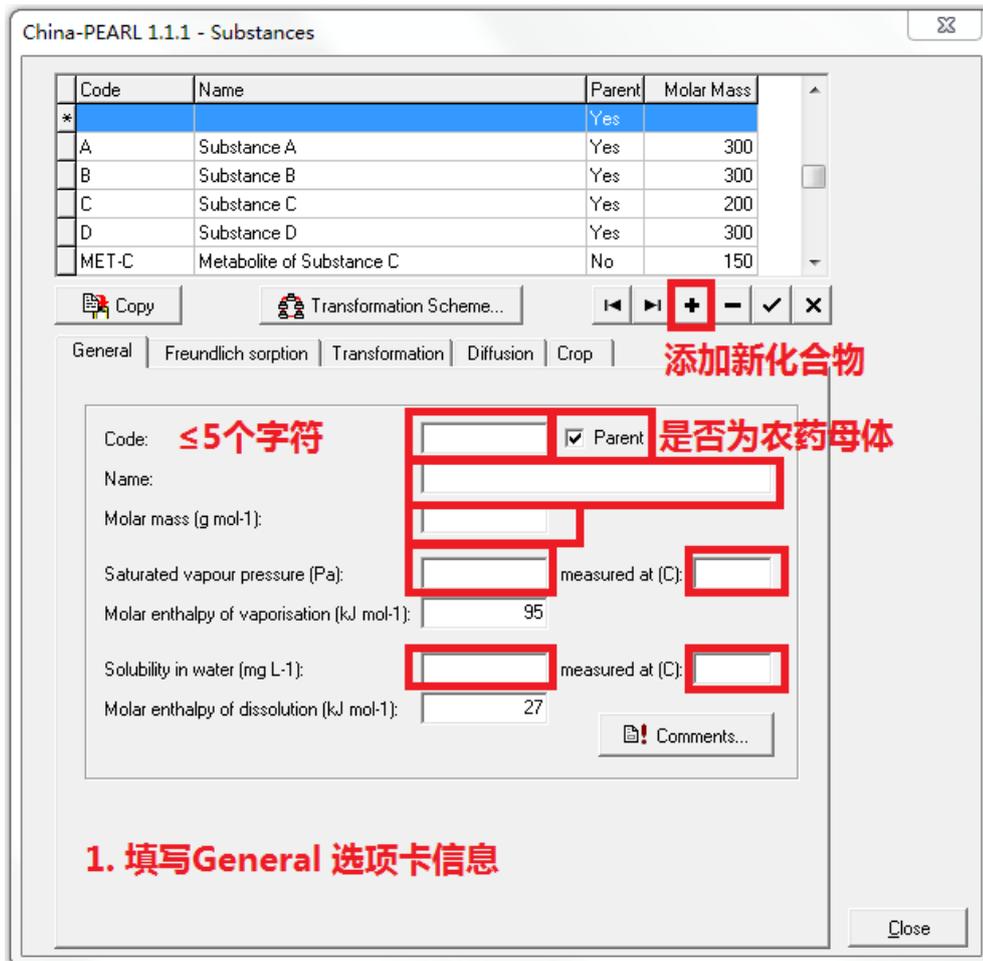
7 创建化合物信息

请参照下述步骤创建化合物：

1. 单击主界面化合物组合框右侧的浏览按钮进入到化合物数据界面



2. 单击导航区的+按钮。在常规选项卡(General), 指定化合物代码、名称、摩尔分子量、饱和蒸气压以及水中溶解度。



3. 在土壤吸附(Freundlich Sorption)选项卡中, 需要给出化合物的有机质吸

附系数

China-PEARL 1.1.1 - Substances

Code	Name	Parent	Molar Mass
*		Yes	
A	Substance A	Yes	300
B	Substance B	Yes	300
C	Substance C	Yes	200
D	Substance D	Yes	300
MET-C	Metabolite of Substance C	No	150

Copy Transformation Scheme...

General Freundlich sorption Transformation Diffusion Crop

Option: Kom, pH-independent

Equilibrium sorption
pH - independent
Kom (coef. for sorption on org. matter [L kg⁻¹): measured at (C):

2. 填写化合物的Kom数据

Molar enthalpy of sorption [kJ mol⁻¹):

Equilibrium sorption
Reference concentration in liquid phase (mg L⁻¹):
Freundlich sorption exponent (-):

Non-equilibrium sorption
Desorption rate coefficient [d⁻¹):
Factor relating CofFreNeq and CofFreEq (-):

Close

4. 在土壤降解（Transformation）选项卡中，需要给出化合物的降解半衰期。

China-PEARL 1.1.1 - Substances

Code	Name	Parent	Molar Mass
*		Yes	
A	Substance A	Yes	300
B	Substance B	Yes	300
C	Substance C	Yes	200
D	Substance D	Yes	300
MET-C	Metabolite of Substance C	No	150

Copy Transformation Scheme...

General Freundlich sorption Transformation Diffusion Crop

5. 单击保存按钮

Transformation 3. 填写化合物的土壤好氧降解半衰期和测定温度

Half-life (d): measured at (C):

Optimum moisture conditions (pF 2 or wetter): **4. 此处需勾选上**

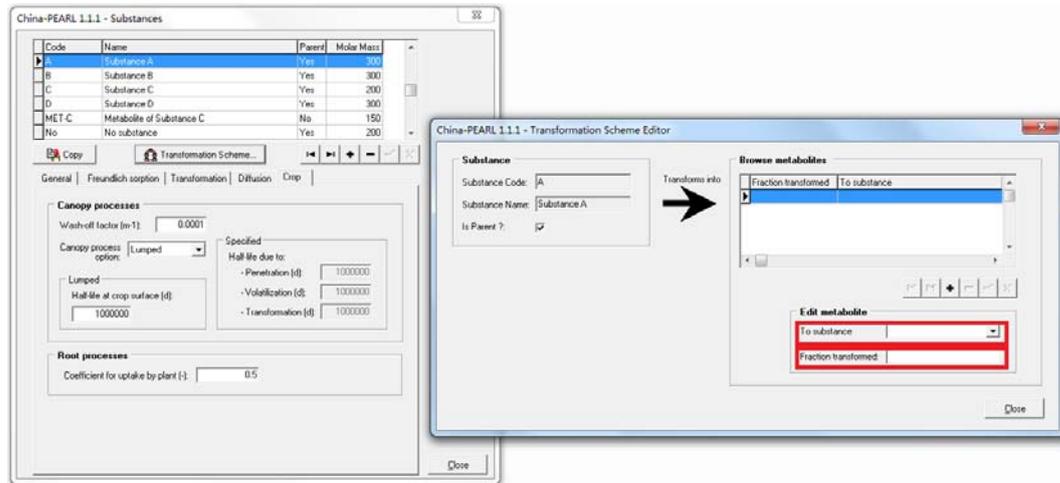
Liquid content in incubation experiment (kg kg⁻¹):
Exponent for the effect of liquid (-):

Molar activation energy [kJ mol⁻¹):

Close

5. 完成编辑后，单击关闭(Close)按钮回到主菜单。

从主界面可以到达化合物界面。China-PEARL模型可以模拟农药母体及其代谢产物在土壤的环境行为。这就要求指定转化率数据（Fraction transformed）。



8 编辑农药施药信息

施药信息导航区的+按钮添加一个新的施药信息或者复制一个已经存在的施药信息。首先选择施药信息模式：“绝对日期施药（Absolute applications）”和“相对日期施药（Relative applications）”。

对于绝对日期施药（Absolute applications），首先选择施药方式：“土壤表面喷雾（To the soil surface）”、“土壤注射（Injection）”、“拌土等土壤处理或种衣剂（Incorporation）”、“叶面喷雾，由模型计算拦截系数（To the crop canopy, interception fraction calculated by the model）”、“叶面喷雾，由用户指定拦截系数（To the crop canopy, interception fraction calculated by the user）”。而后输入施药时间和施药剂量。手动输入常规的日期格式。如果选择“土壤注射Injection”和“拌土等土壤处理或种衣剂（Incorporation）”两种施药方式，用户必须额外提供注射深度或土壤处理深度。用户必须指定年份，但是年份数据不会用的模型计算中。

对于相对日期施药（Relative applications），首先定义作物事件（萌发Emergence或者收获Harvest）。然后定义施药方式：“土壤表面喷雾（To the soil surface）”、“土壤注射（Injection）”、“拌土等土壤处理或种衣剂（Incorporation）”、“叶面喷雾，由模型计算拦截系数（To the crop canopy, interception fraction calculated by the model）”、“叶面喷雾，由用户指定拦截系数（To the crop canopy, interception fraction calculated by the user）”。然后输入在作物事件前或后的间隔（天）以及施药剂量。如果选择“土壤注射Injection”和“拌土等土壤处理或种衣剂（Incorporation）”两种施药方式，用户必须额外提供注射深度或土壤处理深度。

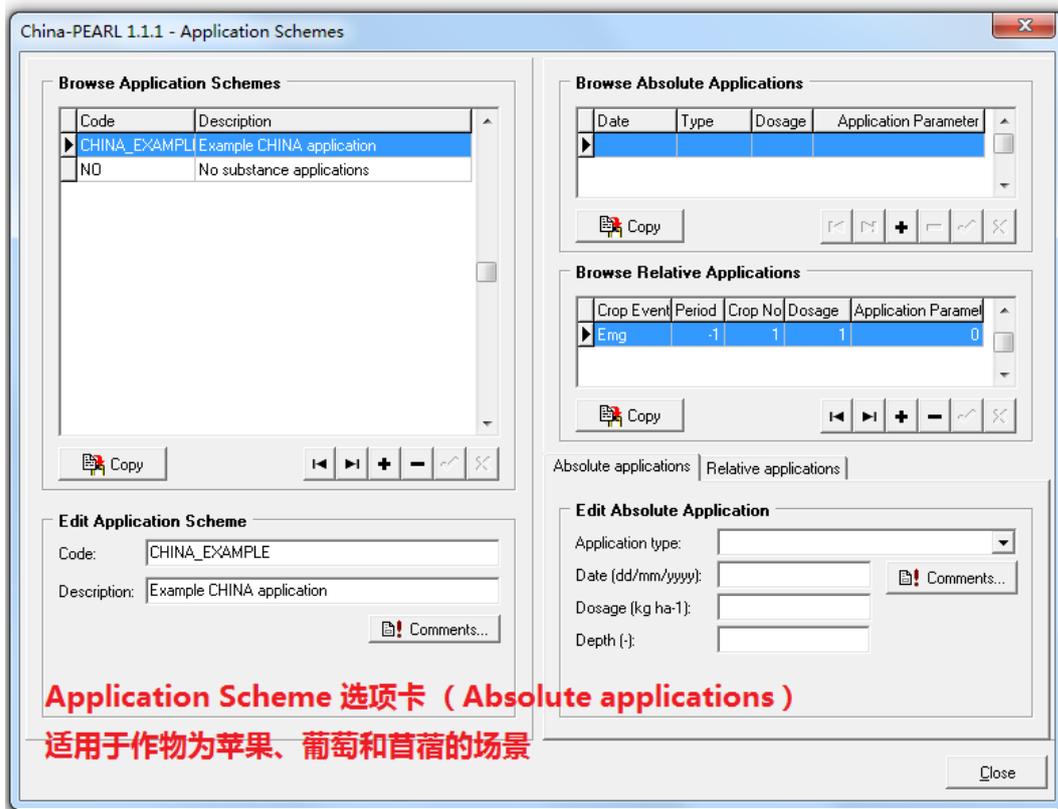


图11 施药信息选项卡 (Absolute applications选项卡)

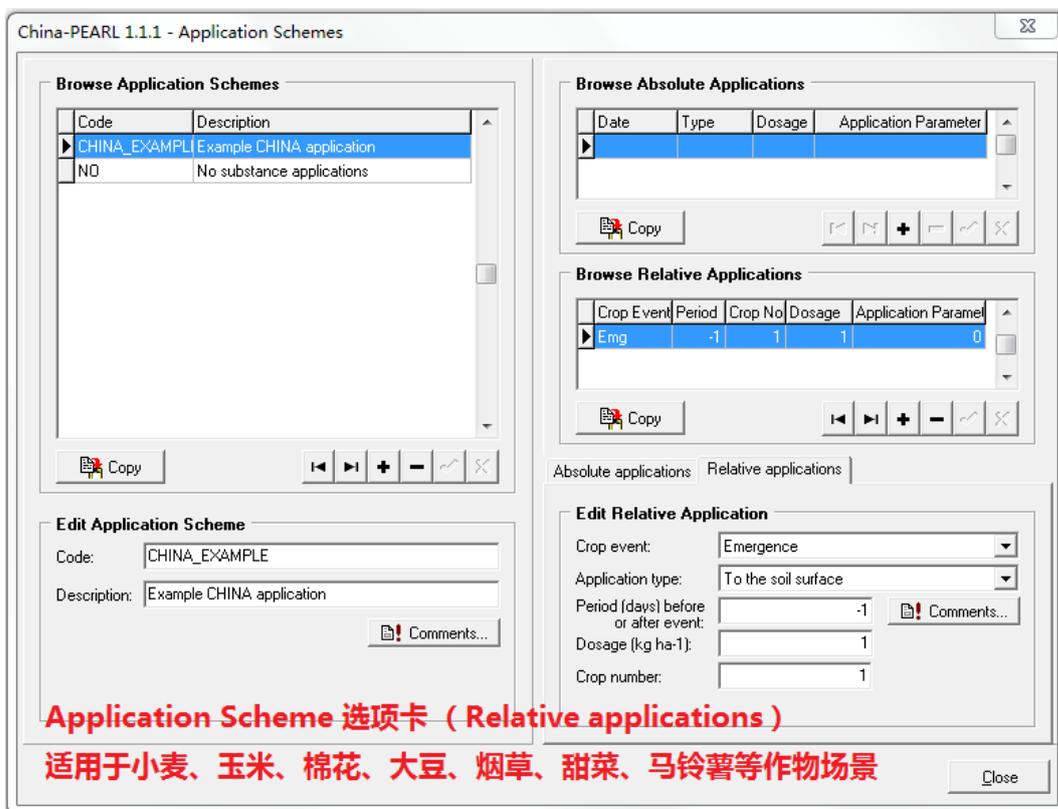
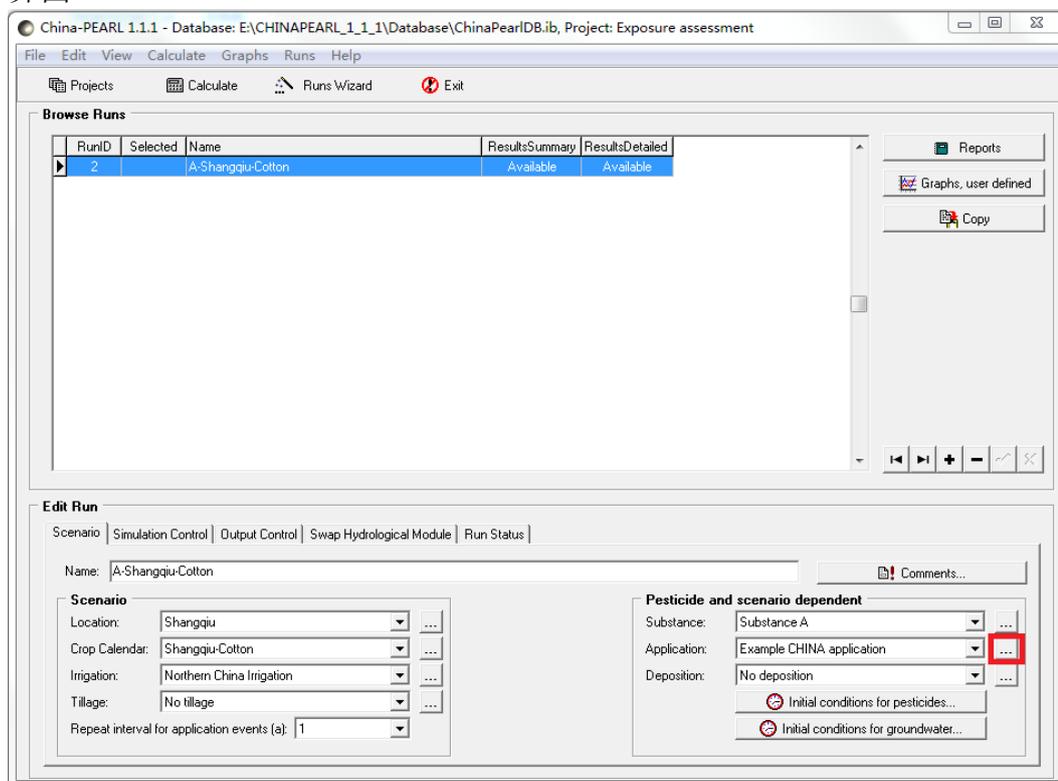


图12 施药信息选项卡 (Relative applications选项卡)

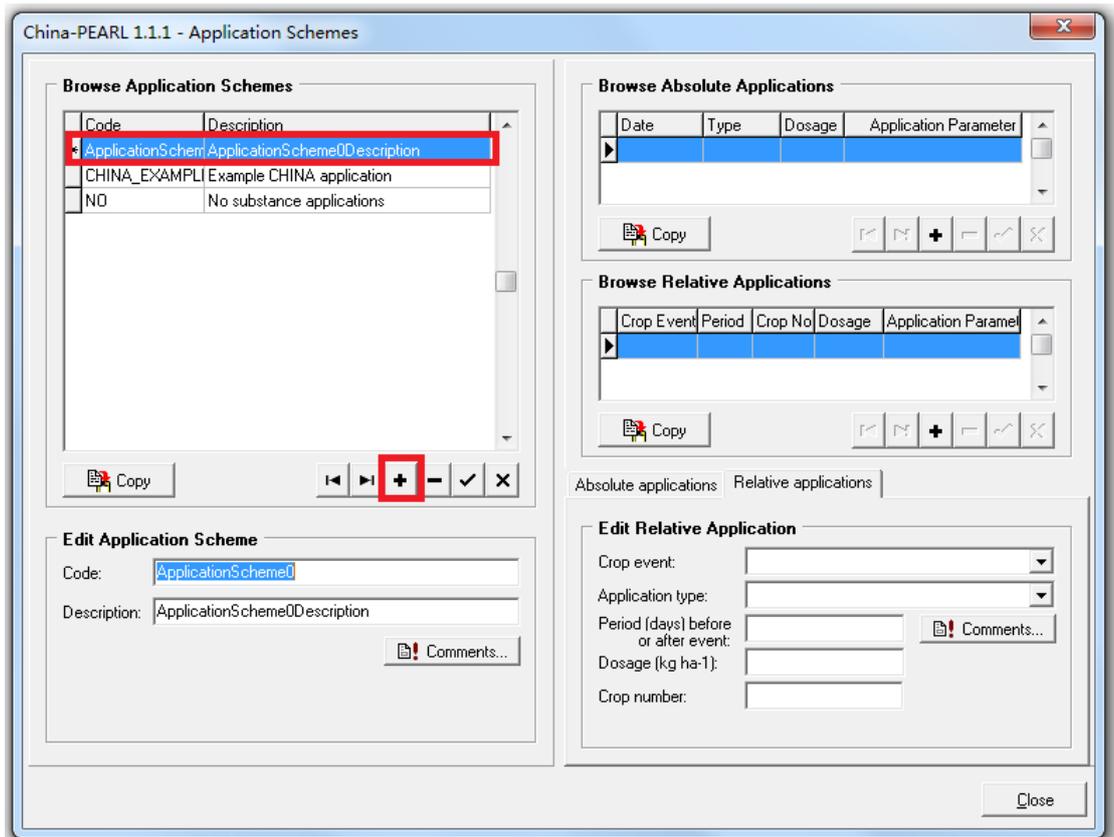
9 创建农药施药信息

请参照下述步骤创建一个农药施药信息：

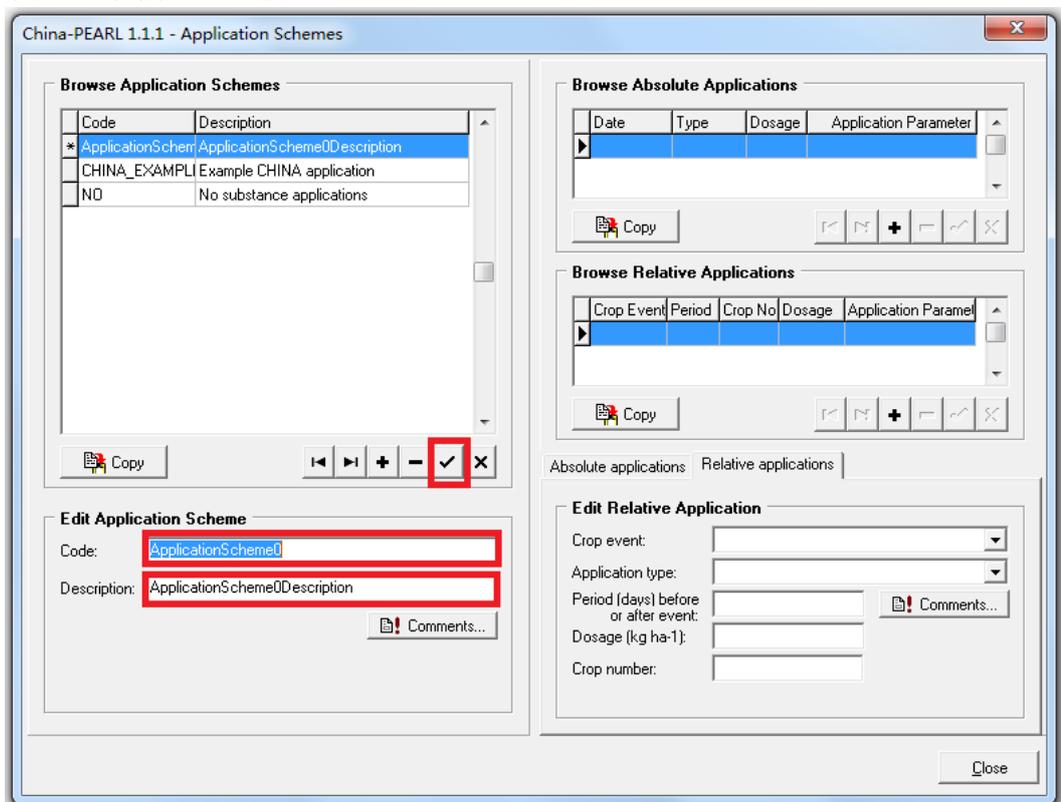
1. 单击主界面中“Application”组合框右侧的浏览按钮进入到农药施药信息界面



2. 单击农药施药信息对话框（application schemes）的导航区中的+按钮（在总框图的左手边）

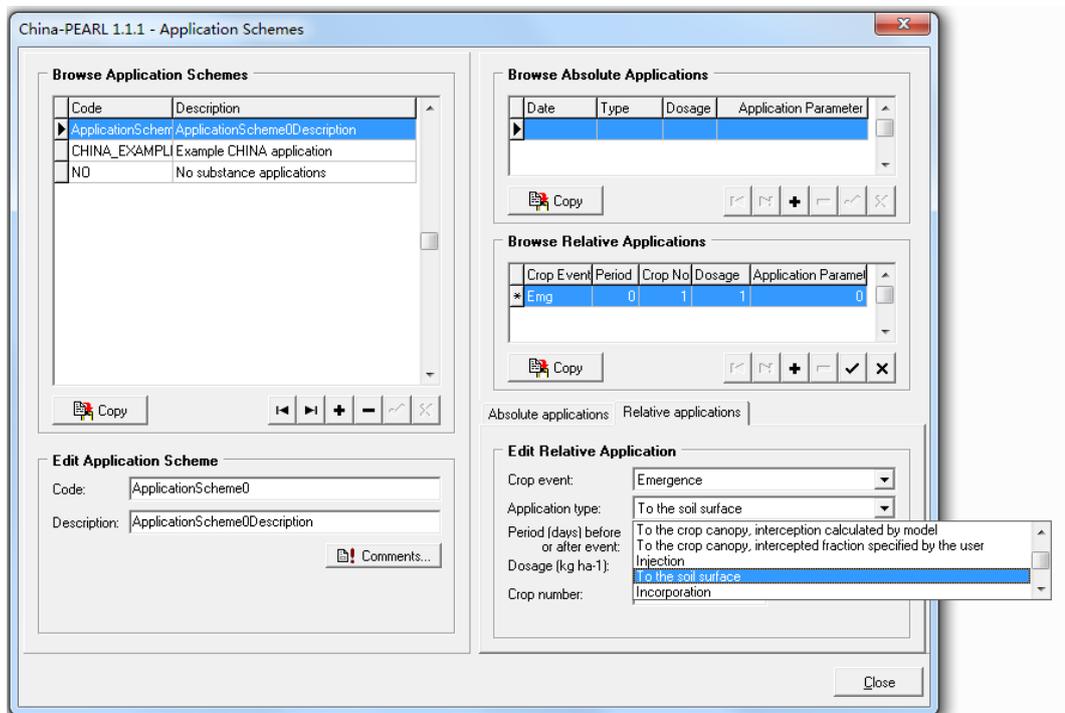
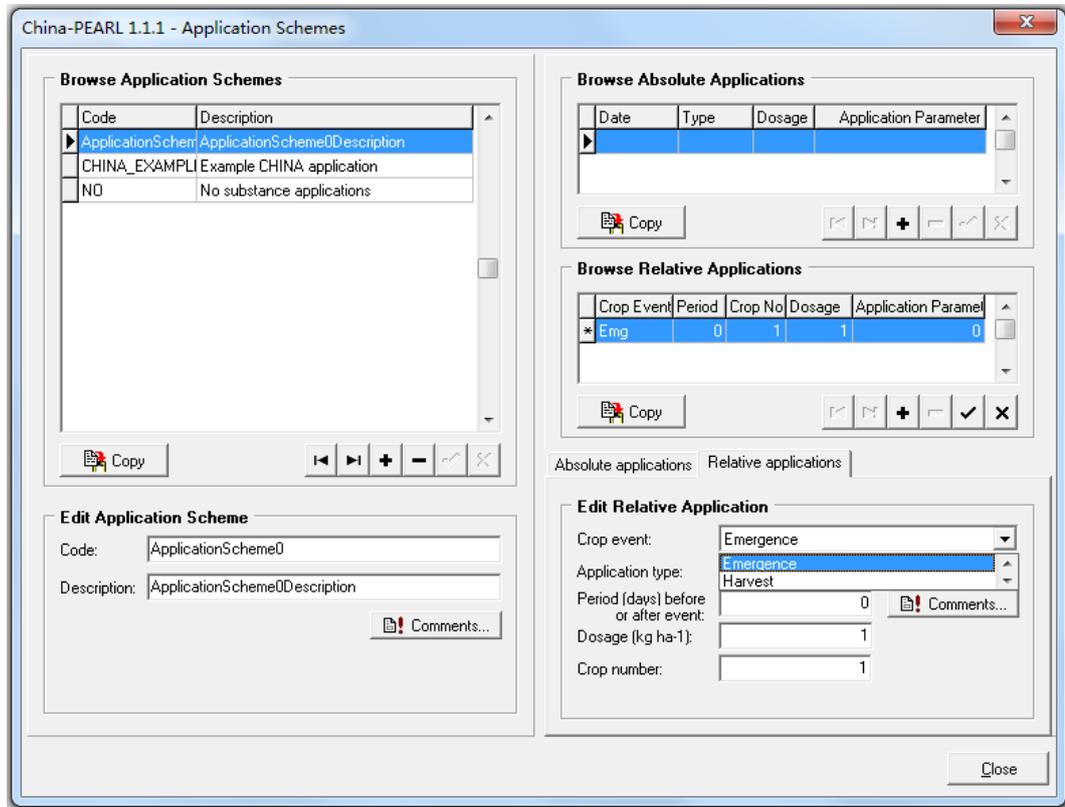


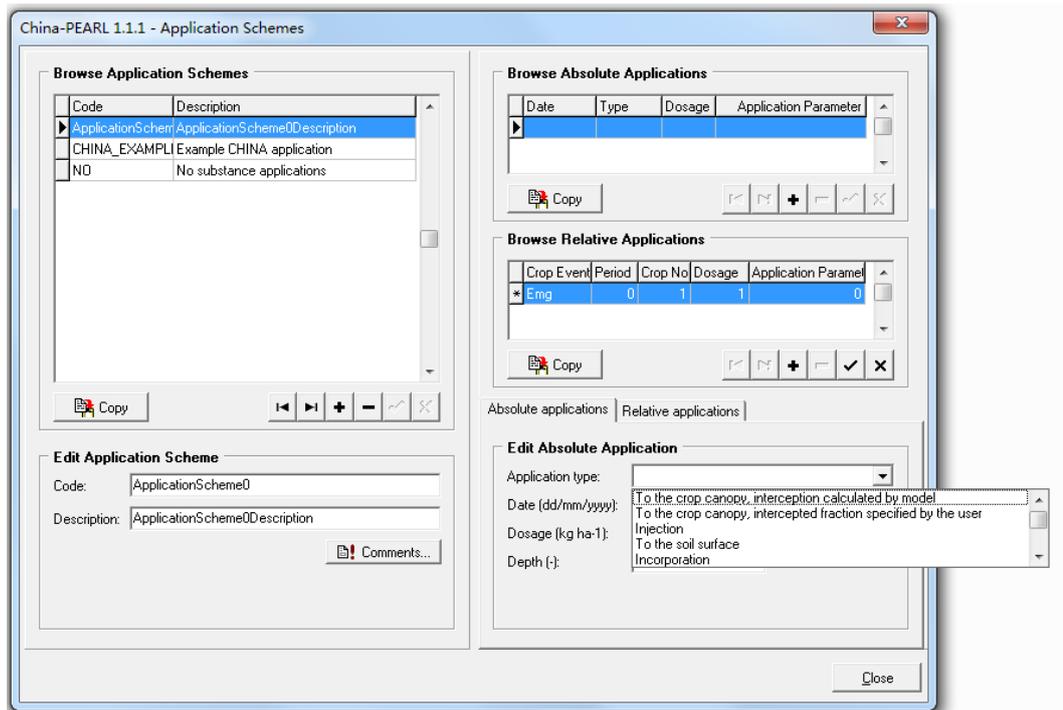
- 填入一个编码和名称



- 单击农药施药对话框（application）的导航区的+按钮（在总框图的右边）以添加一个农药施药条目（在框图右侧：绝对日期施药用或相对日期施药）

- 填入施药日期、施药量、施药方式以及施药深度（只针对incorporation和injection两种施药方式）。在相对日期施药类型中，可以输入一个相对于作物萌芽或收获时的施药日期（如，在农作物萌芽前10天施药）。在绝对日期施药类型中，可以输入一个绝对施药日期（如05/04/1901）。





6. 你可以应用拷贝按钮复制一个已经存在的条目，当你只想更改施药时间时，这样操作很方便。保存后，单击Close按钮回到主界面。

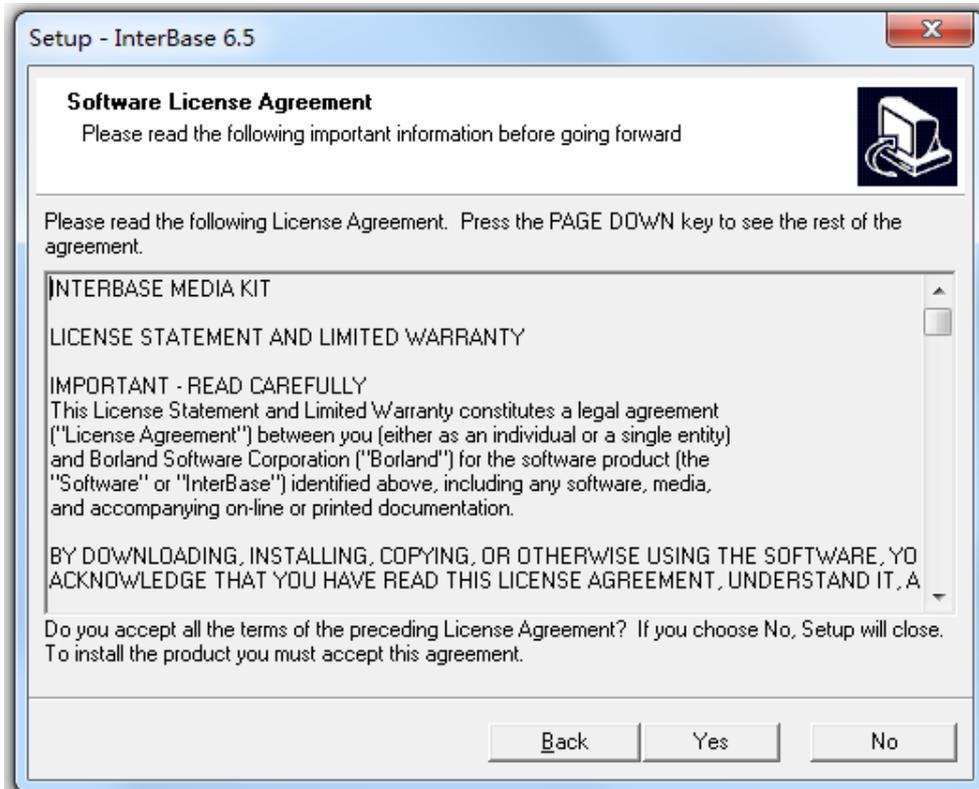
10 China-PEARL 模型安装

10.1 安装 Interbase 6.5

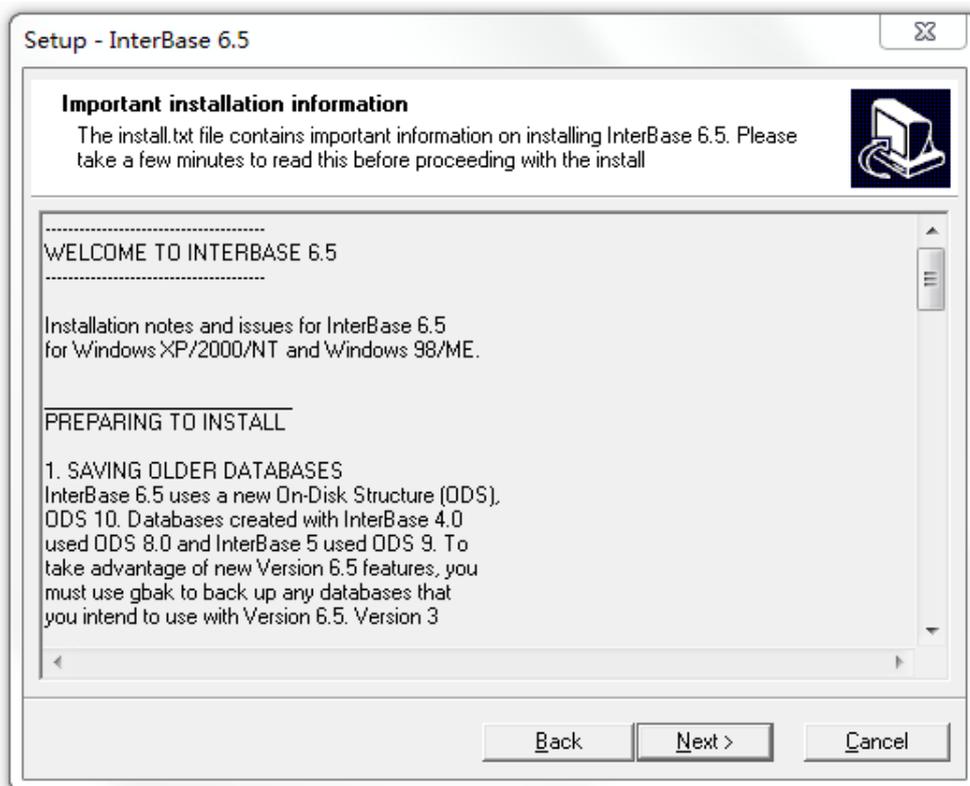
鼠标左键双击“Interbase 6.5”文件夹中的SETUP.exe文件。点击“Next >”按钮；



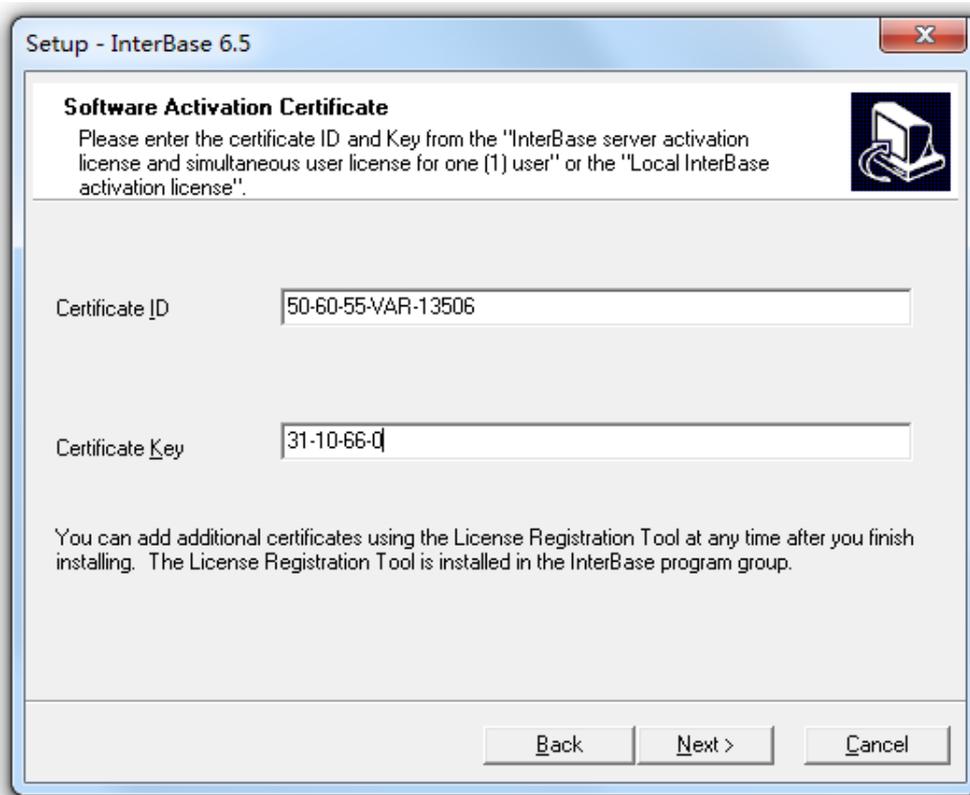
点击“Yes”按钮



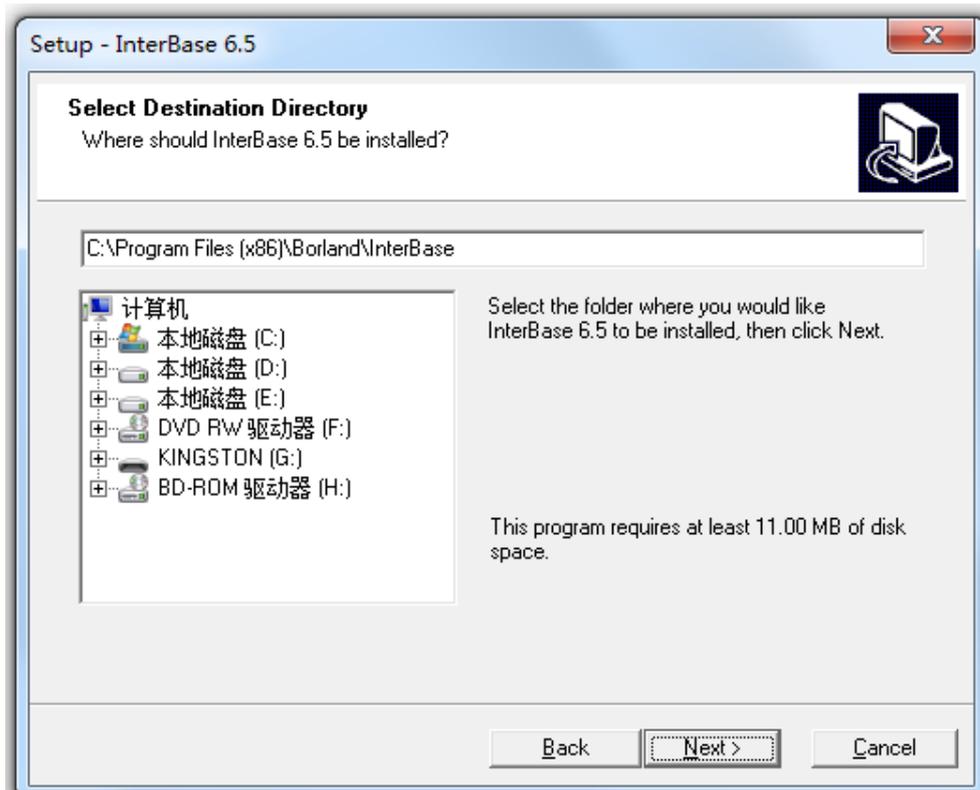
点击“Next >”按钮；



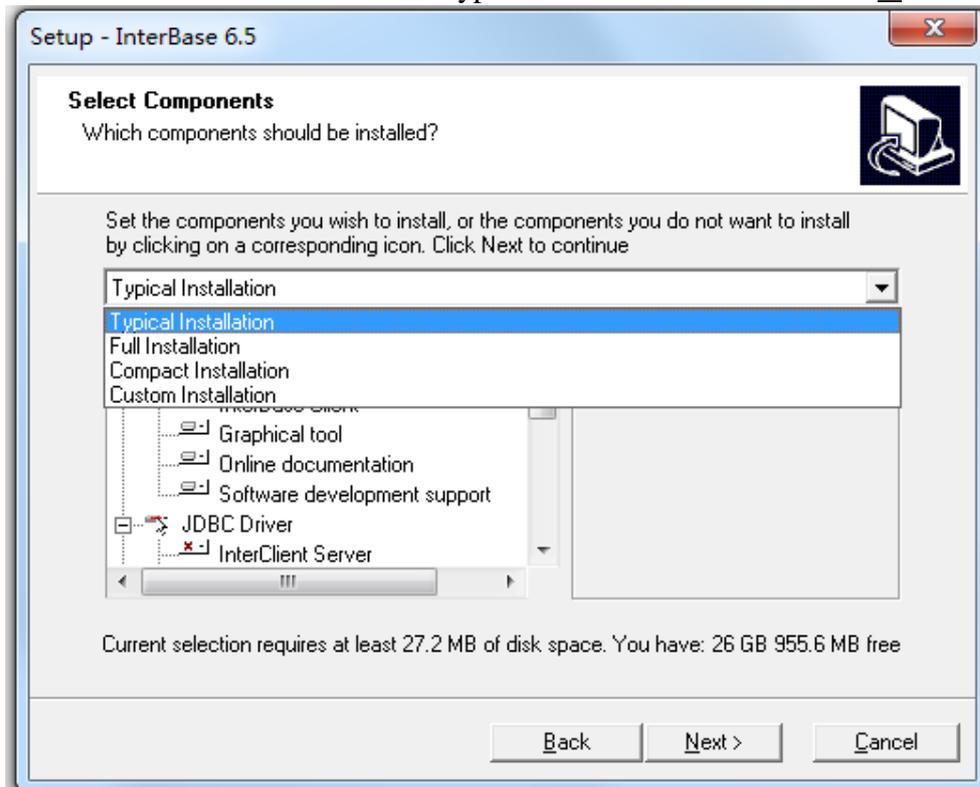
输入Certificate ID: 50-60-55-VAR-13506和Certificate Key: 31-10-66-0; 之后点击“Next >”按钮;



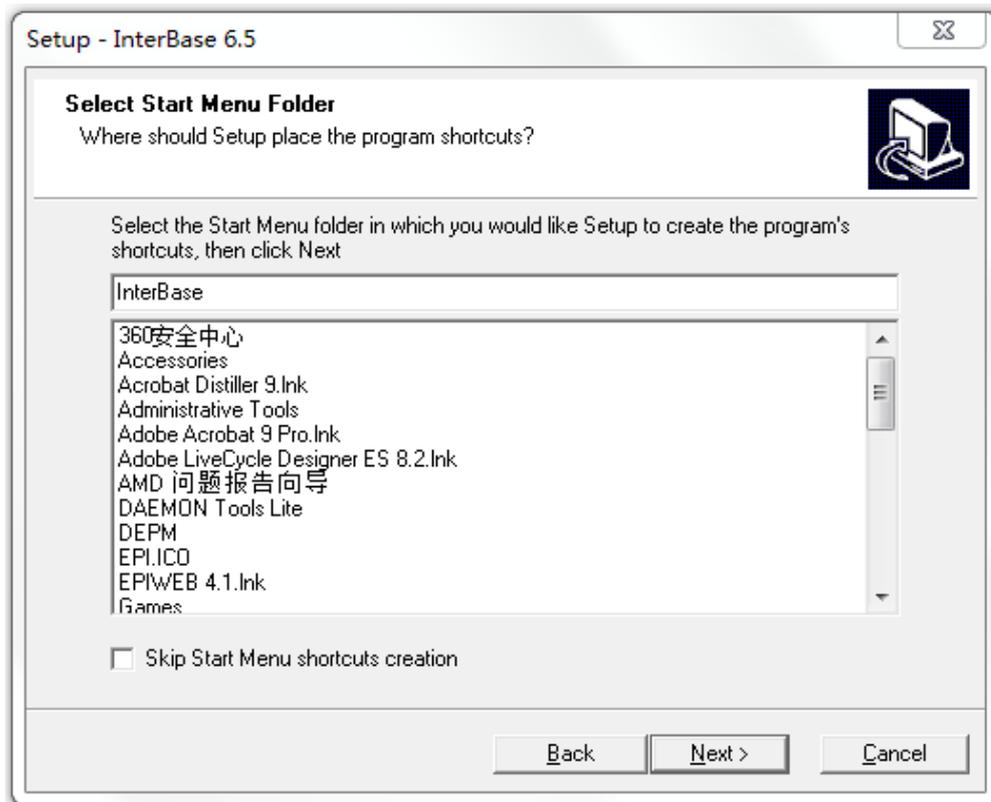
指定文件安装位置，也可使用默认安装路径。点击“Next >”按钮;



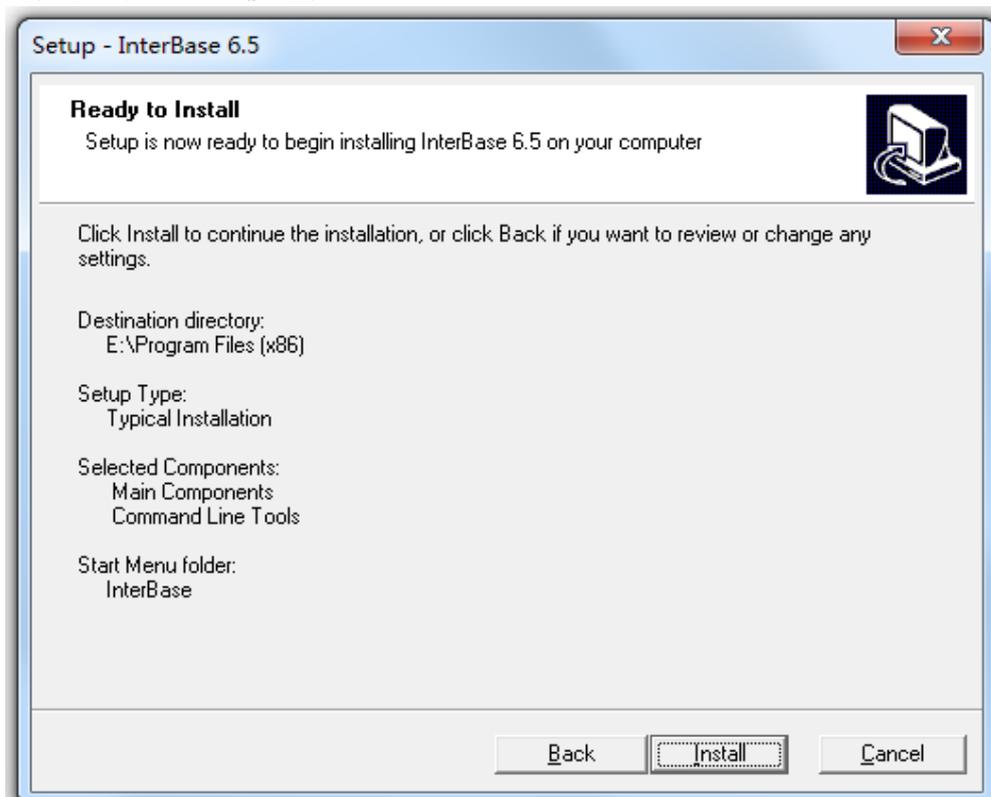
指定安装类型，选择典型安装“Typical Installation”。之后点击“Next >”按钮；



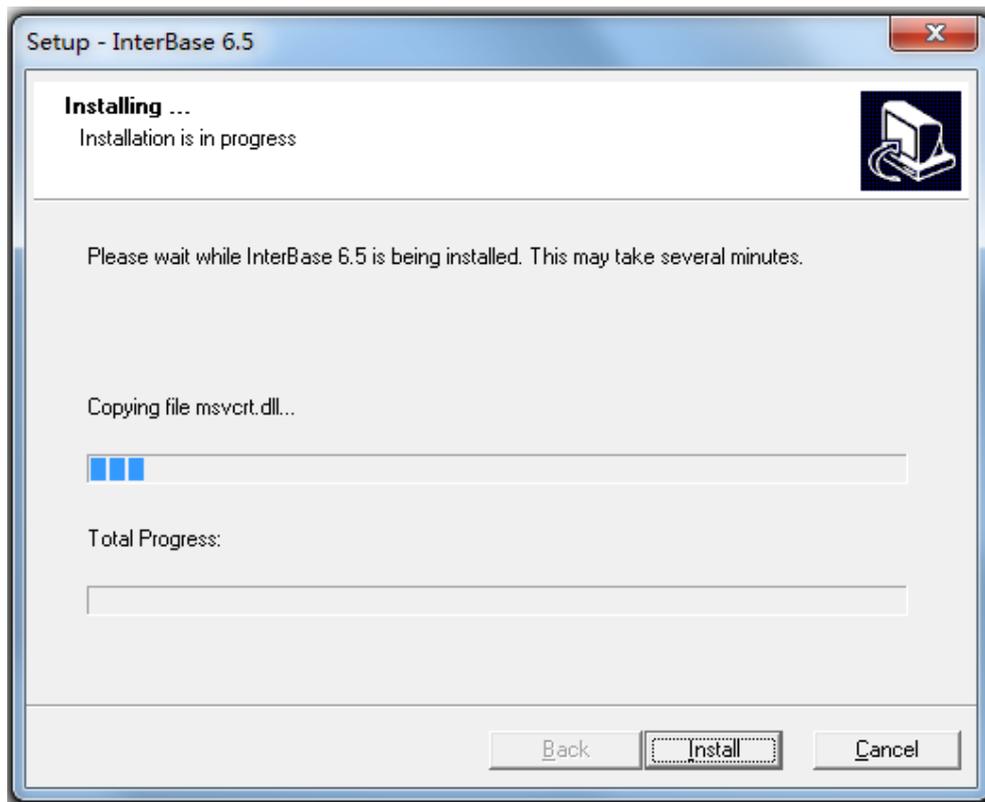
点击“Next >”按钮；



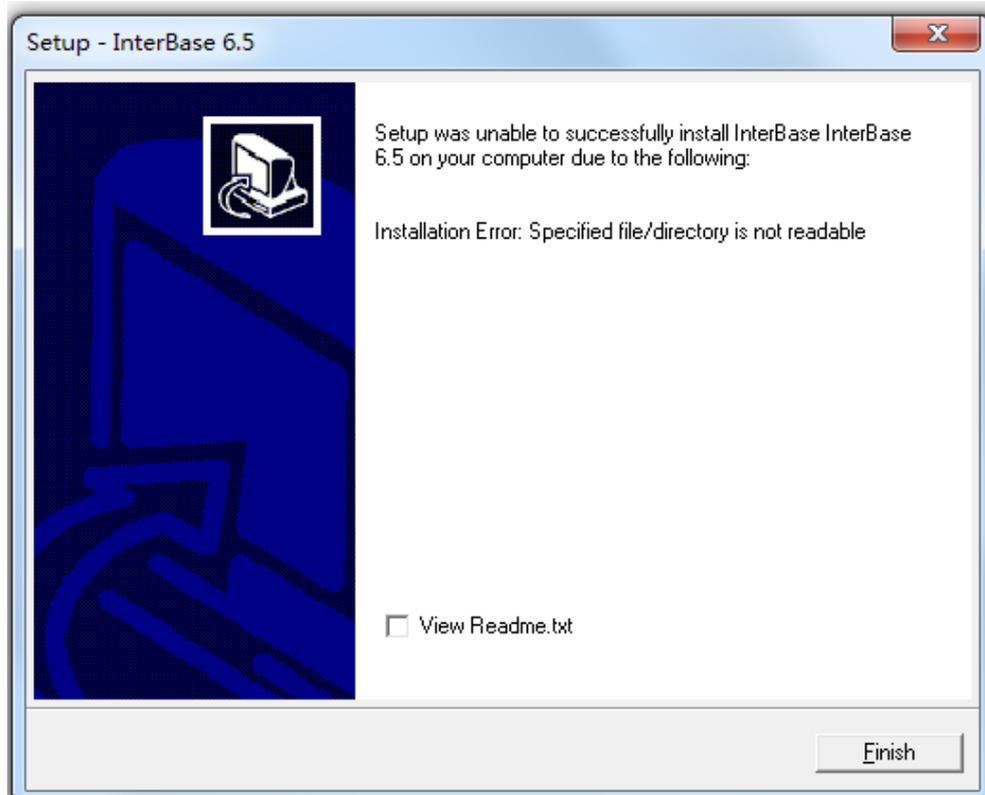
之后点击“Install”按钮；



等待安装完成；



之后点击“Finish”按钮；



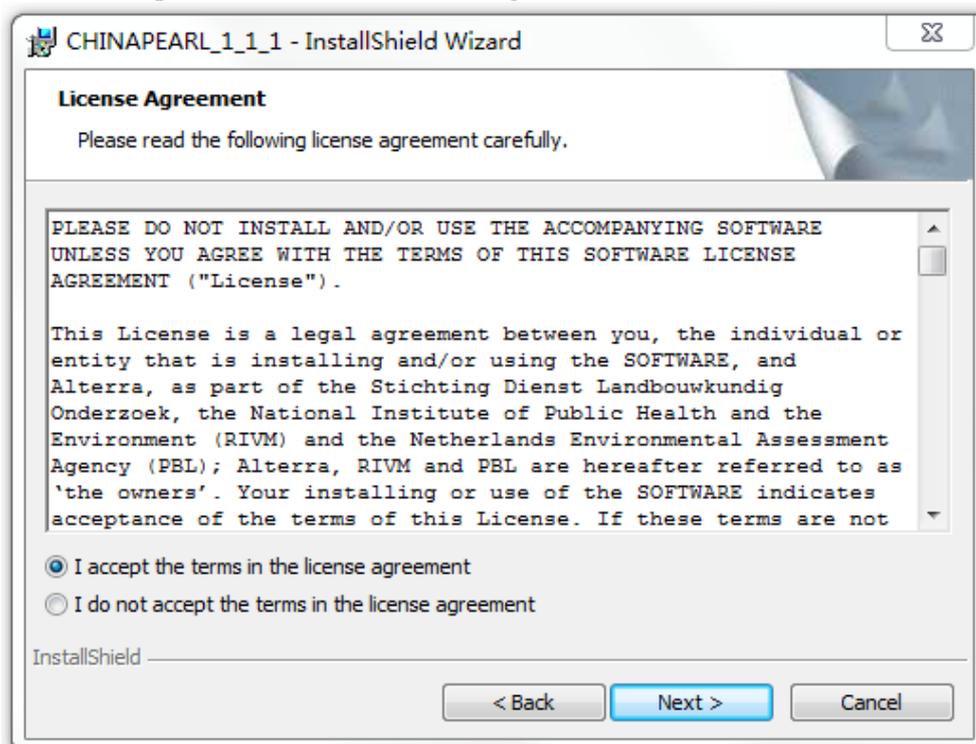
至此，已安装Interbase 6.5。

10.2 安装 China-PEARL

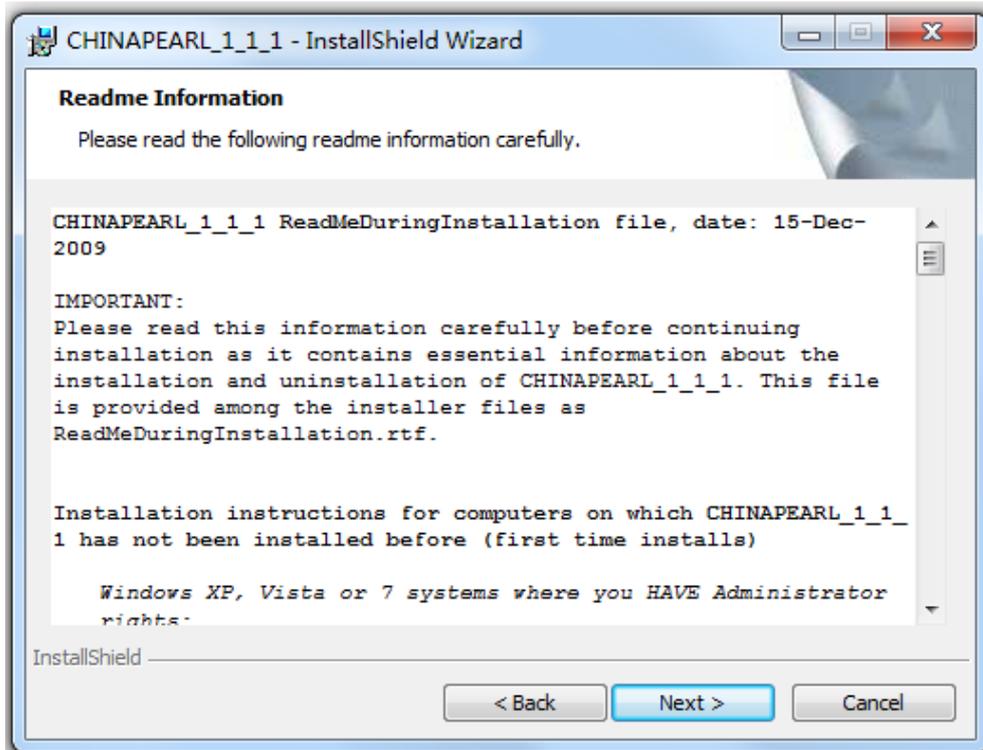
鼠标左键双击Windows Installer程序包，如报错请右键选择“以管理员身份运行”。点击“Next >”按钮；



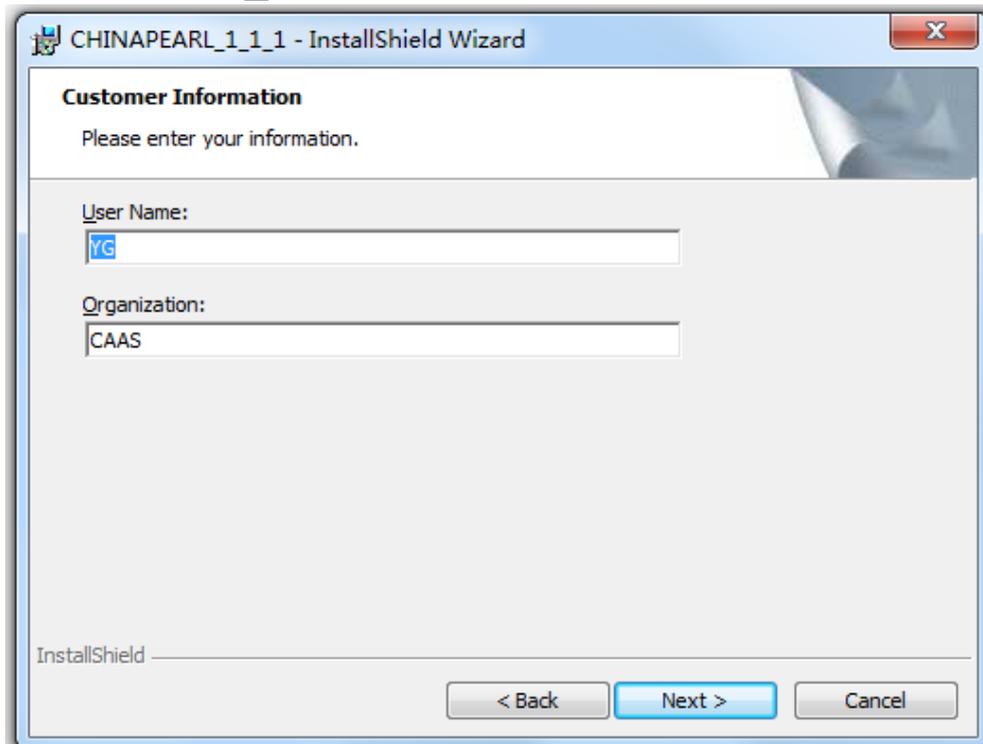
选中“I accept the terms in the license agreement”，点击“Next >”按钮；



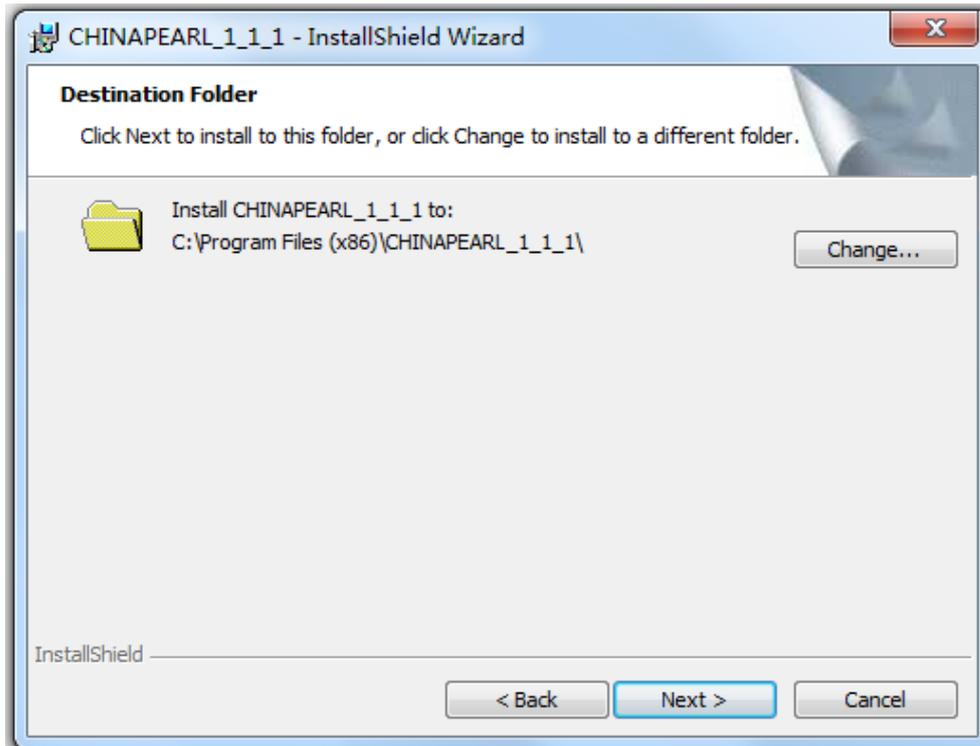
点击“Next >”按钮；



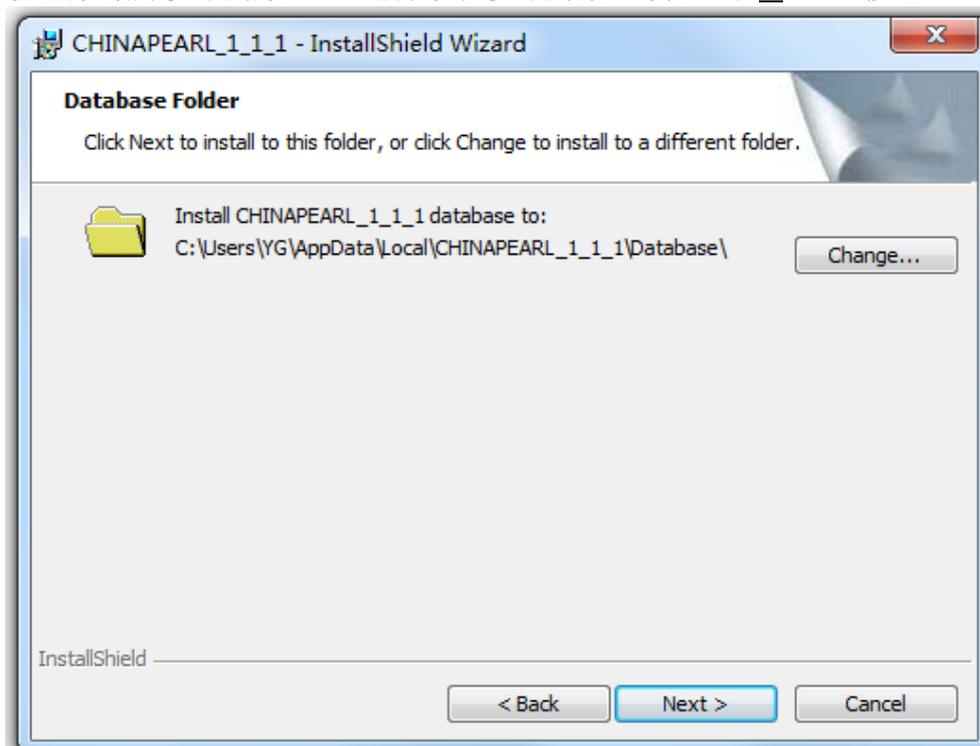
输入信息，点击“Next >”按钮；



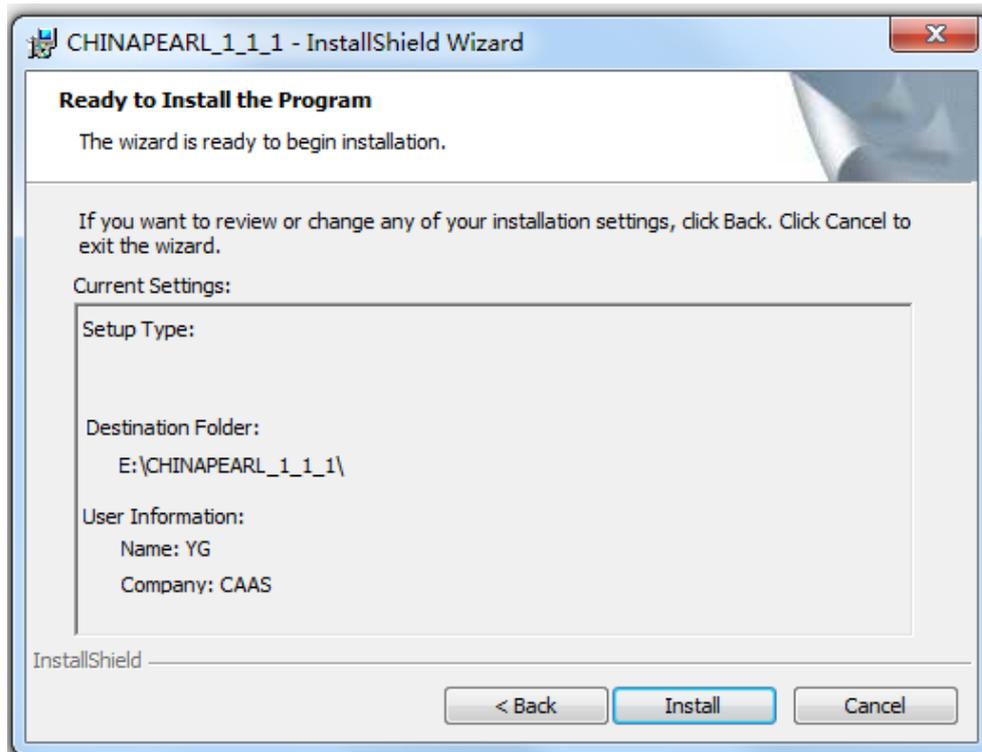
设置安装路径，可选择默认安装路径。并点击“Next >”按钮



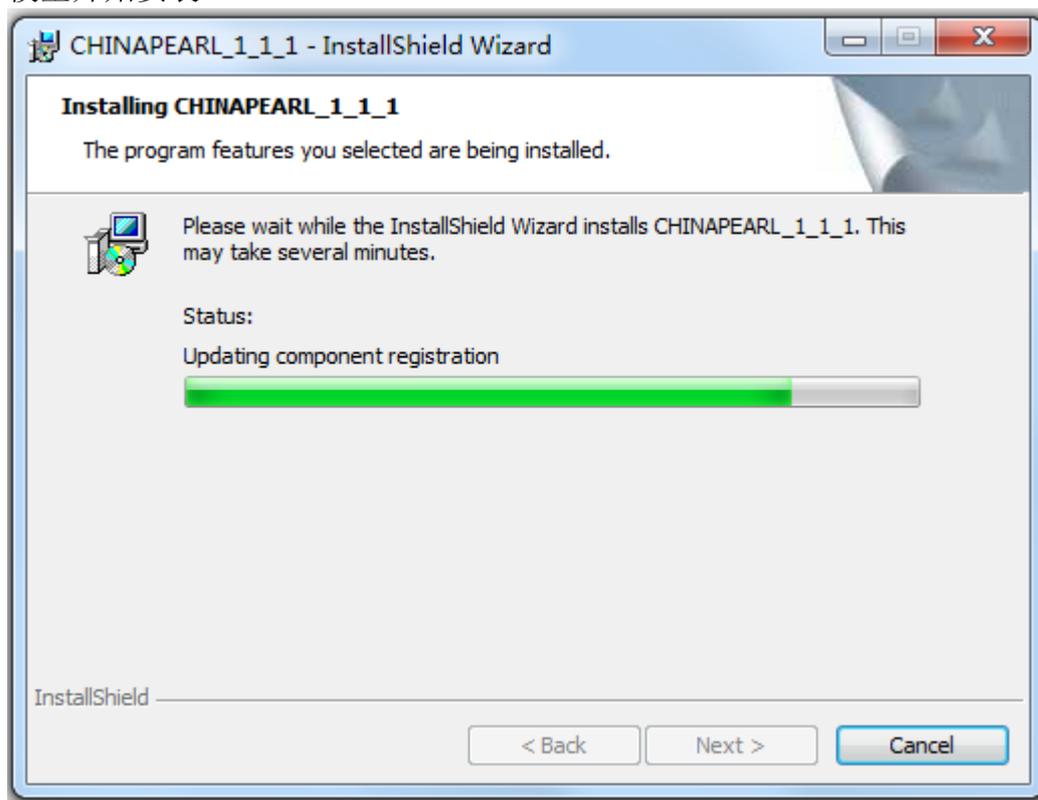
设置数据库安装路径，可选择默认安装路径。并点击“Next >”按钮



点击“Install”按钮



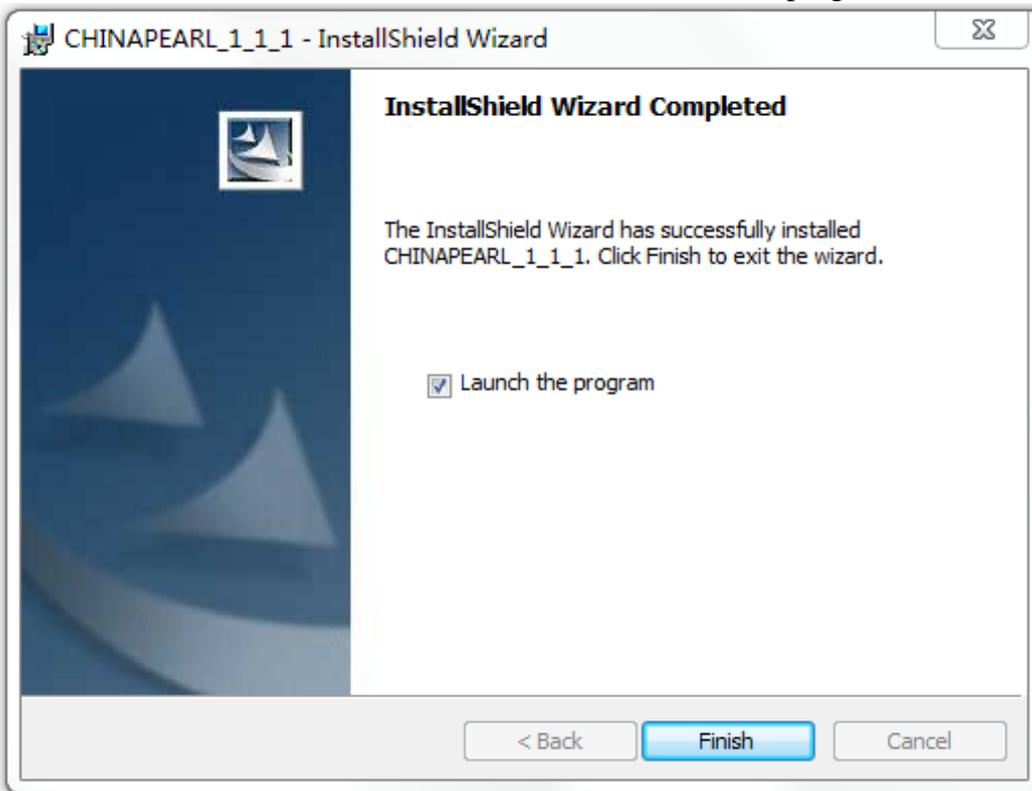
模型开始安装



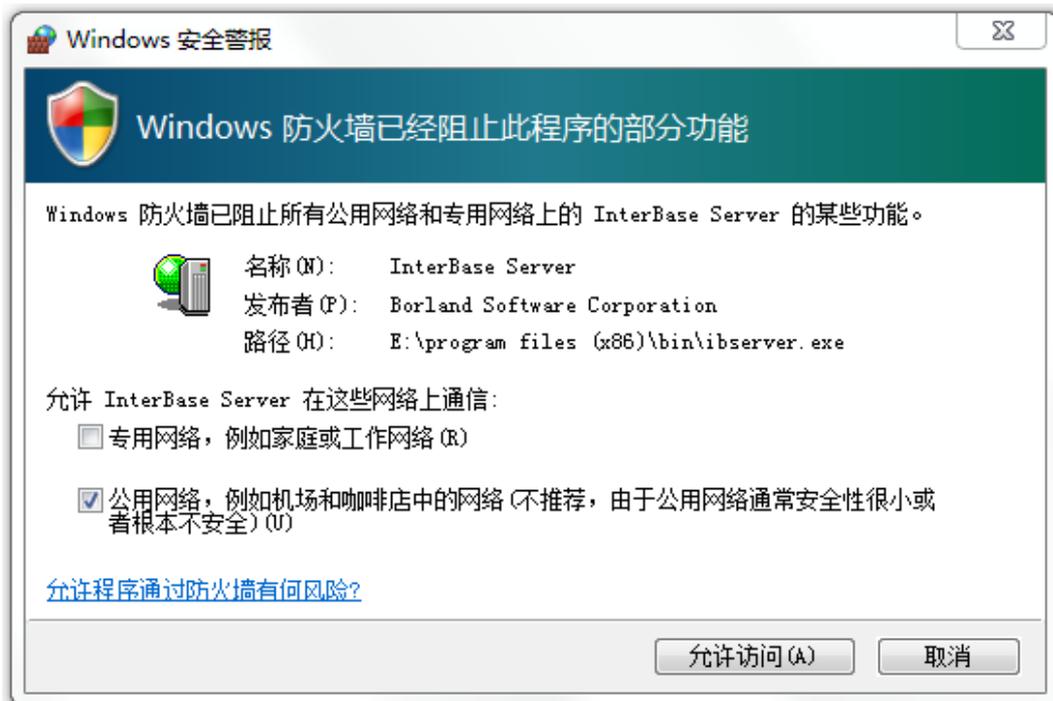
如遇到安全防护软件询问，请点击允许。



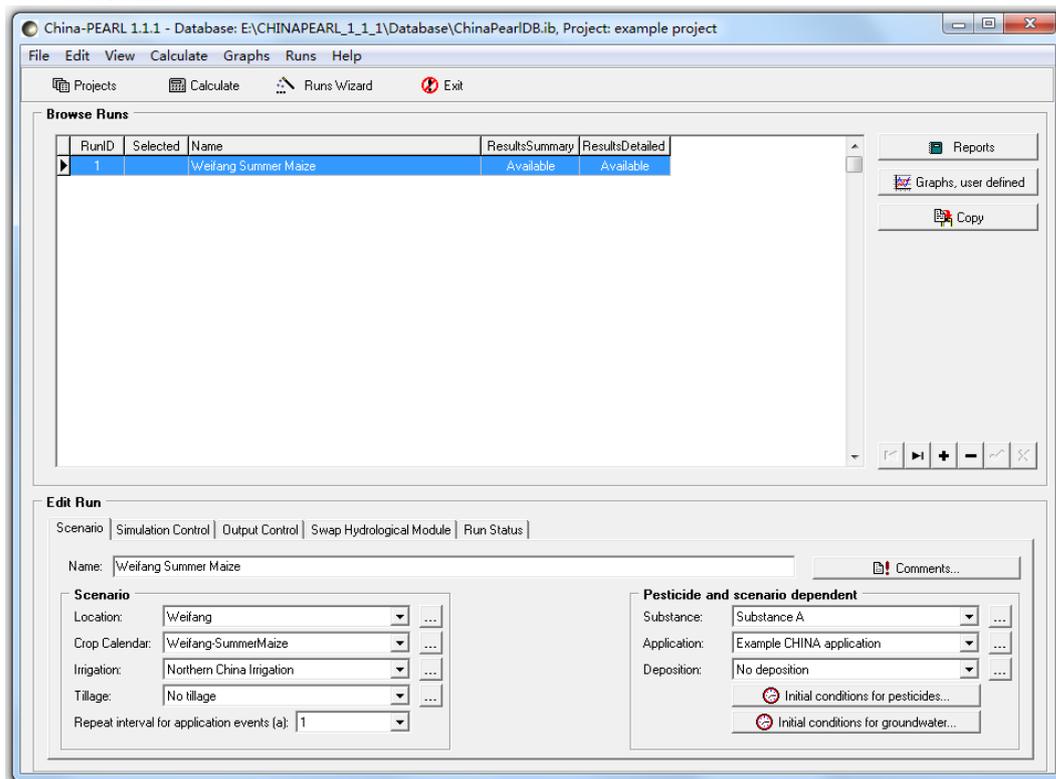
安装完成，点击“Finish”按钮。模型界面开启“Launch the program”。



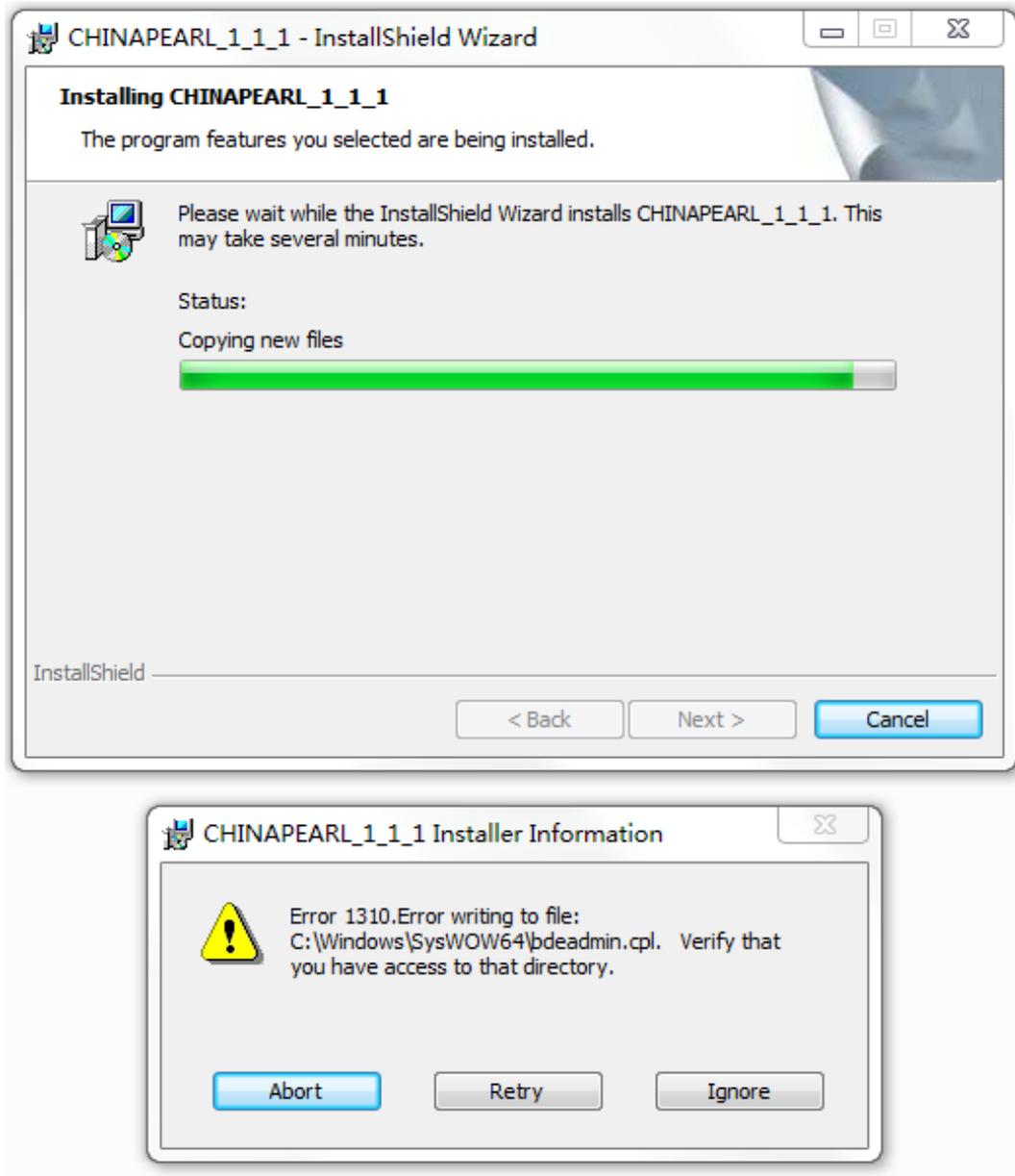
如遇到防火墙弹出，请点击“允许访问”



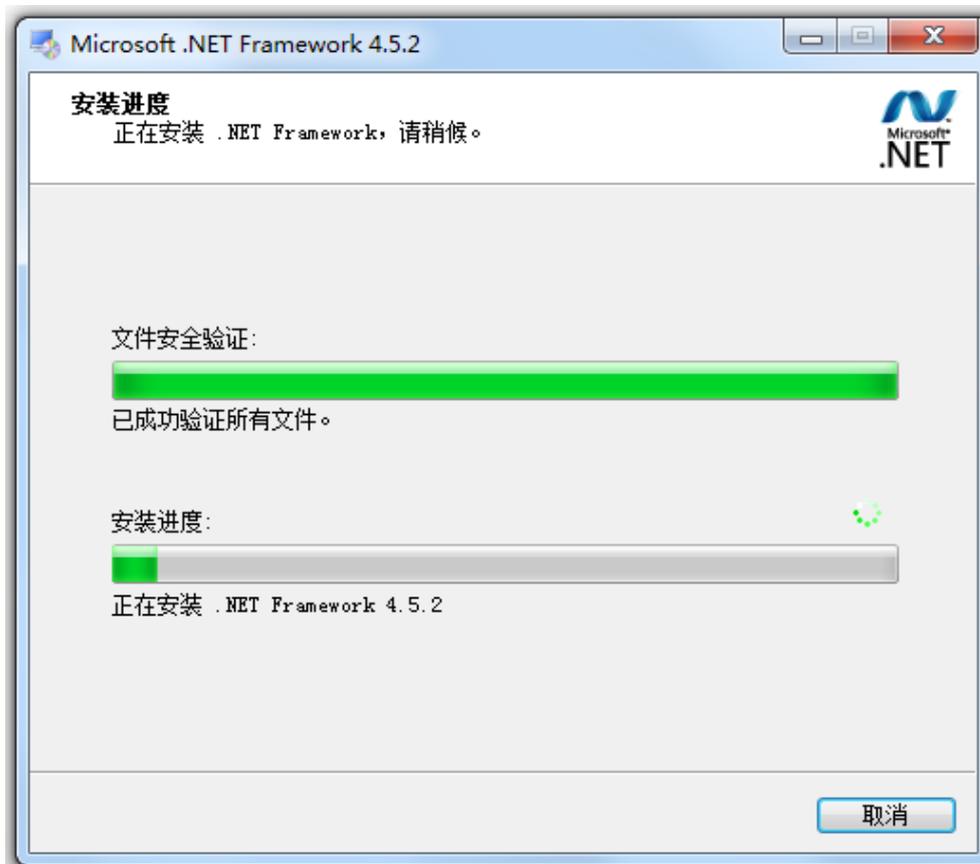
下图为模型界面



如果您在安装时有报错（如下图所示），请将计算机上的“.NET Framework”更新为4.5.2版本或更高版本。安装顺序如下：



勾选我已阅读并接受许可条款（A）



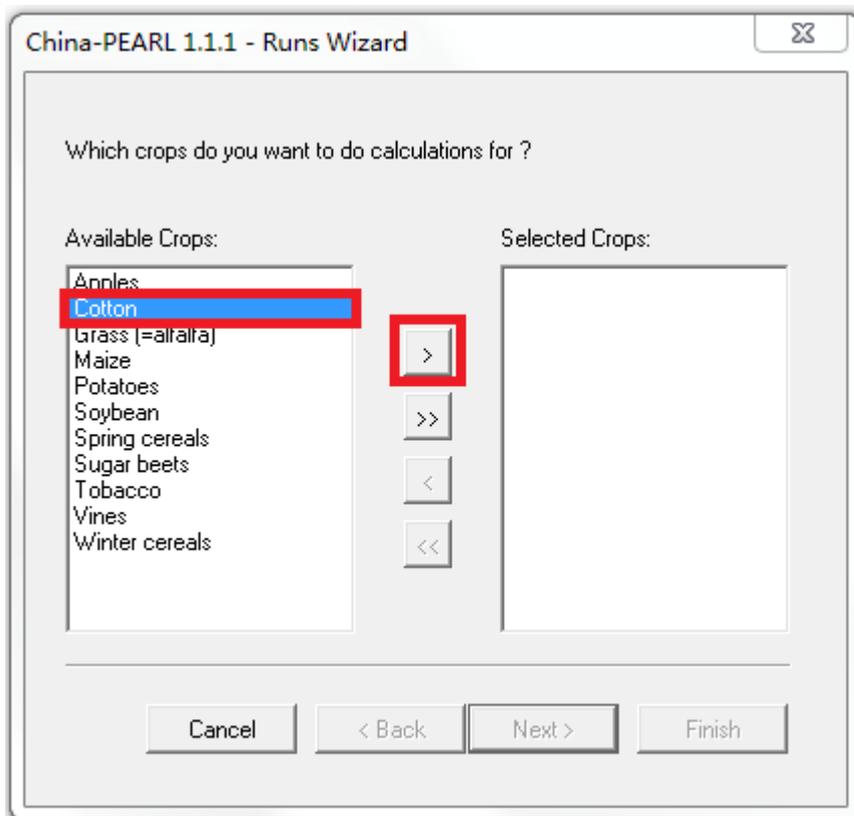


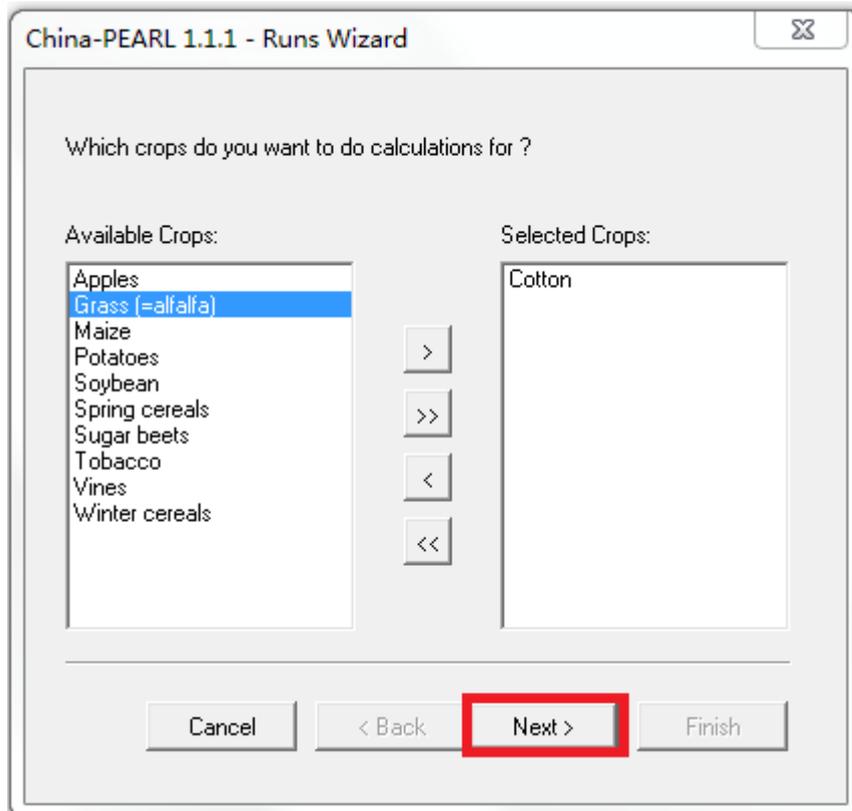
附件 1：暴露评估案例

以商丘场景点 Substance A 施药在棉花田上为例，评估其在地下水中的浓度水平。

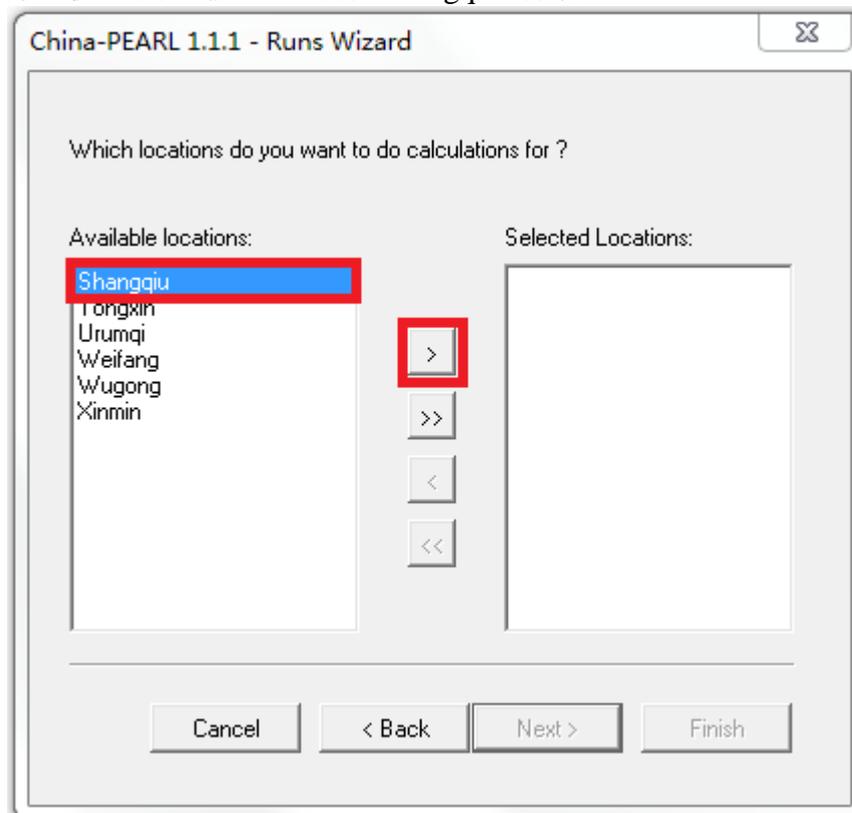
第一步：启动运行向导（Runs Wizard）

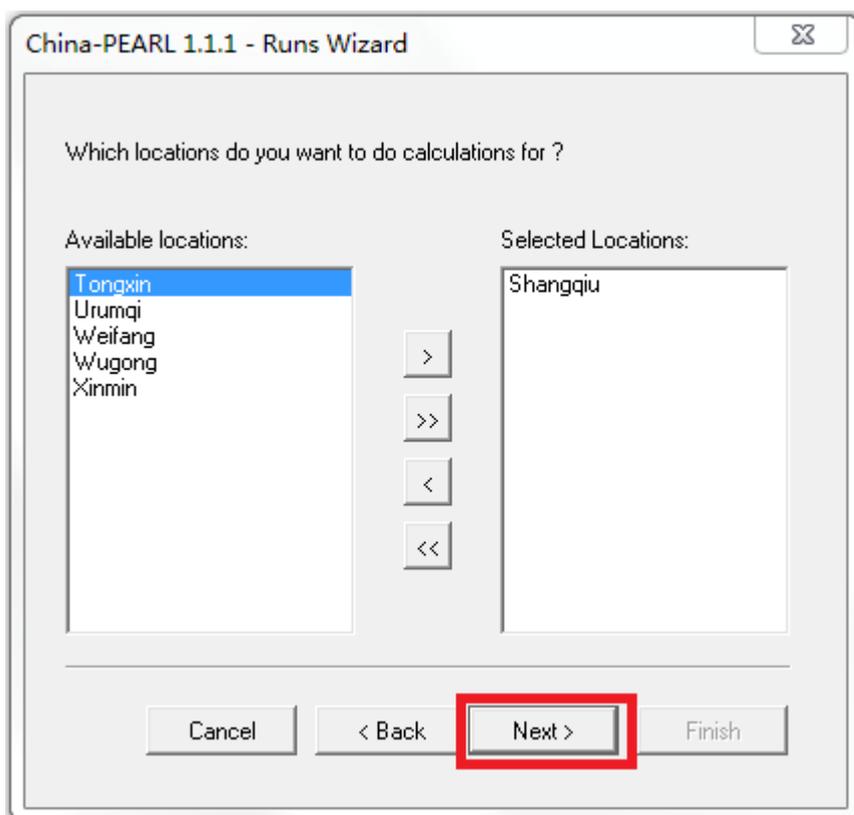
第二步：选择“Cotton”，按下一页（Next）>按钮。



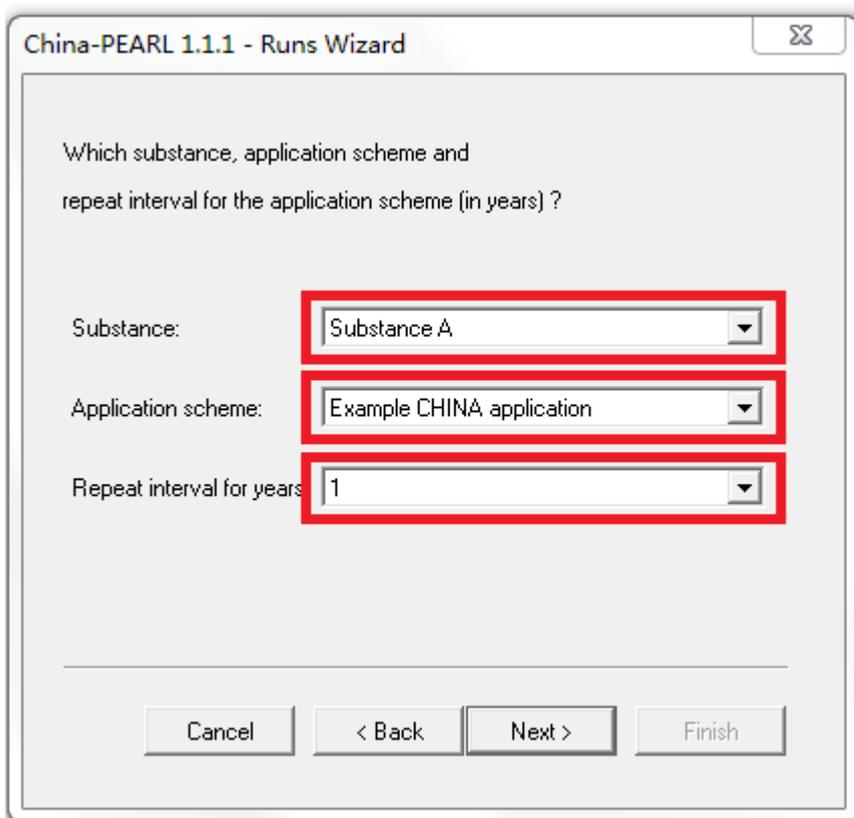


第三步：用>>按钮，选择“Shangqiu”场景点。

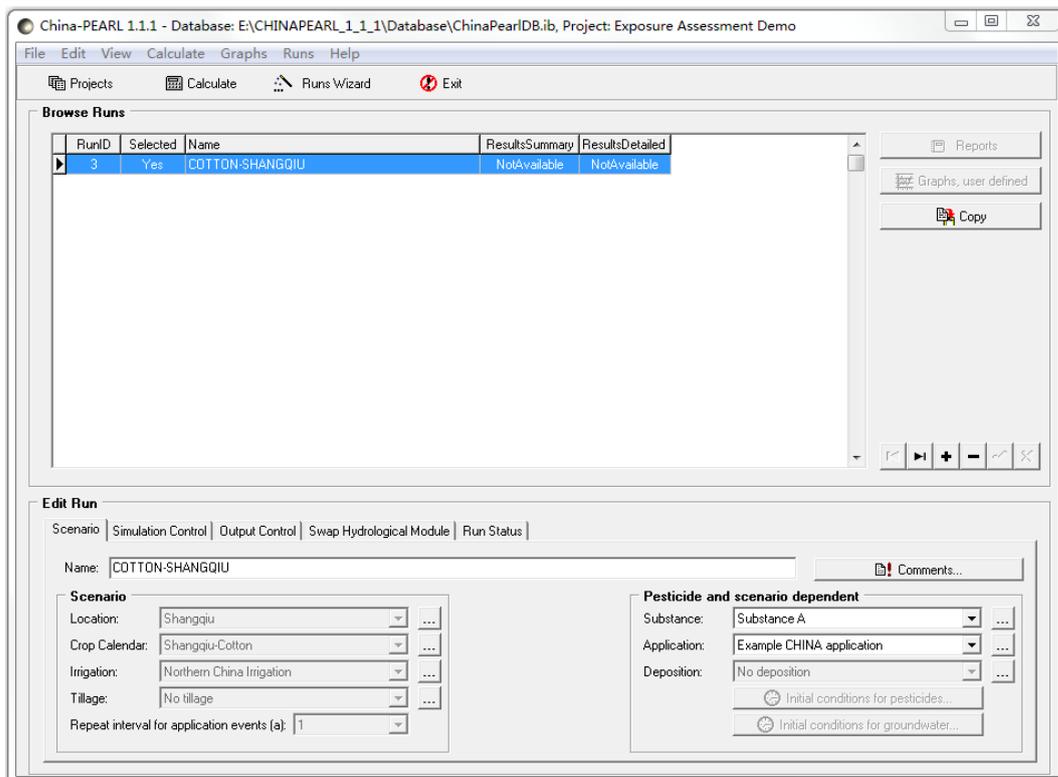
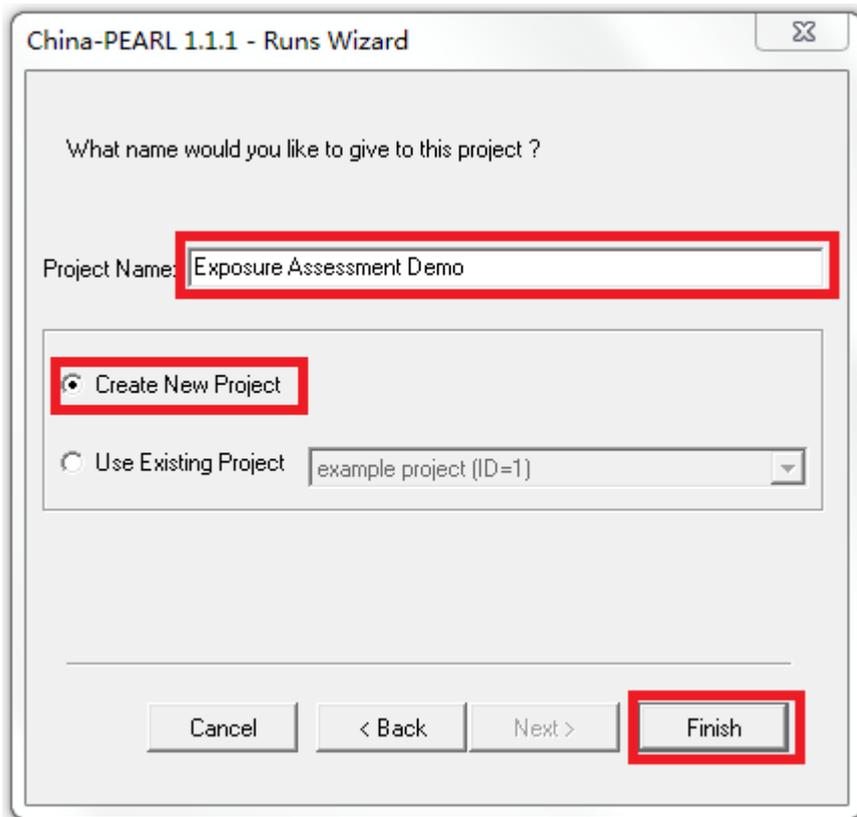




第四步：选择化合物，施药信息，和重复间隔。用户只能从已经存在的化合物和施药信息中选择。

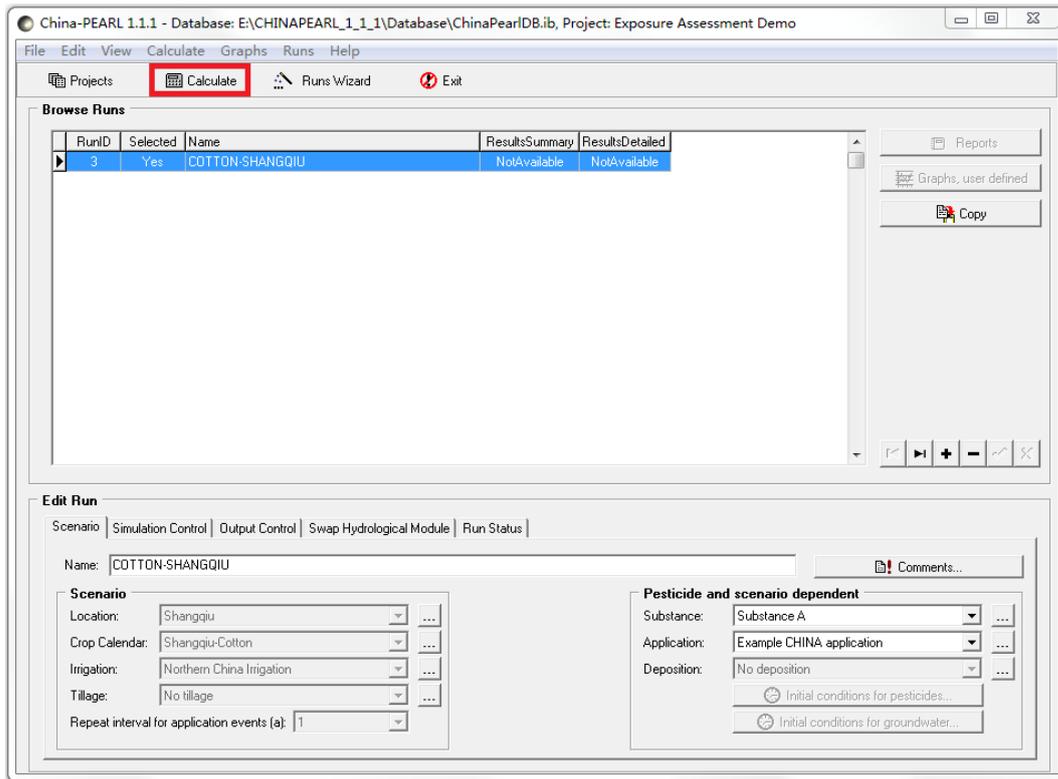


第五步：China-PEARL创建一个新的项目。

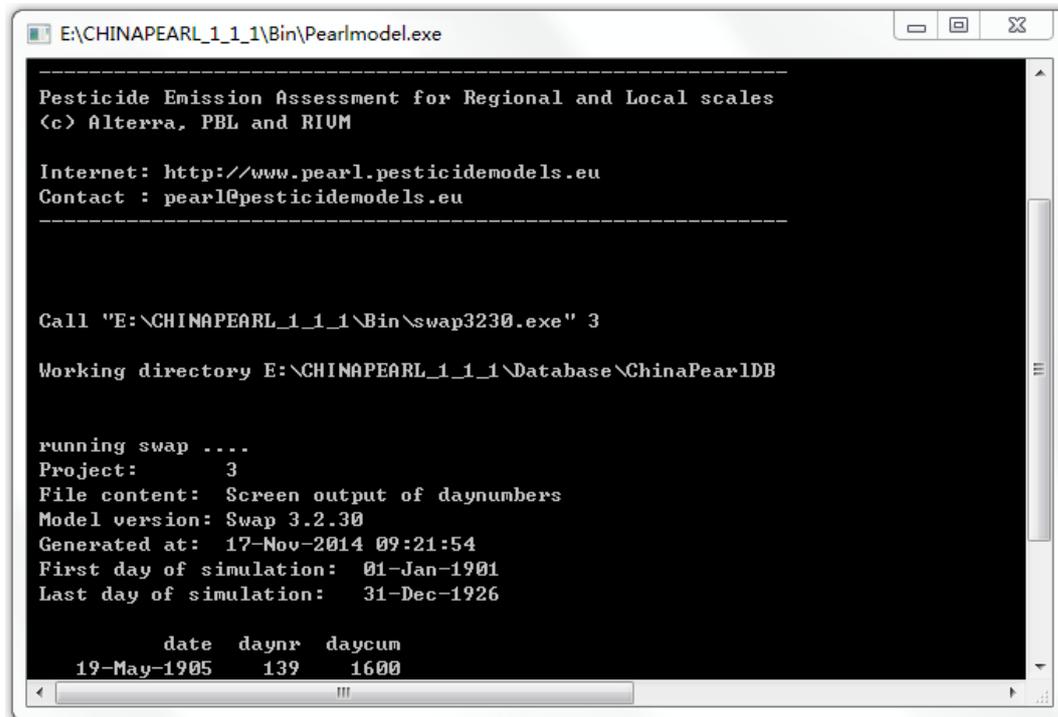


第六步：如果需要，用户现在可以为单个运行条目（Run）来编辑化合物信息（Substance）和施药信息（Application）。

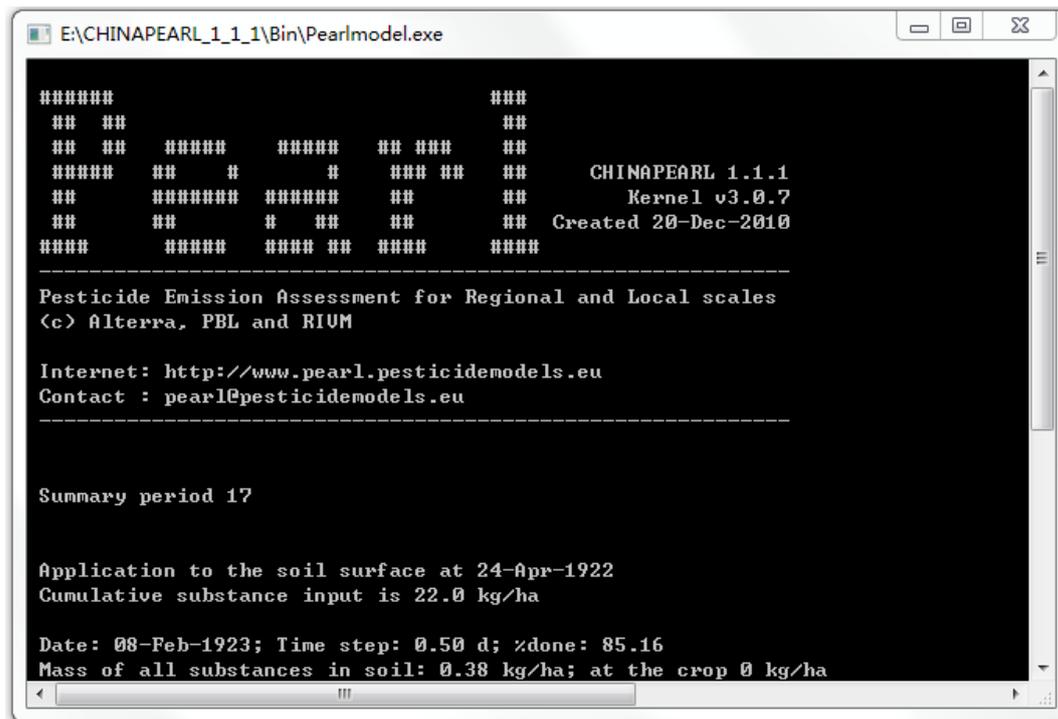
第七步：点击“Calculate”按钮



模型运算界面（1）



模型运算界面（2）

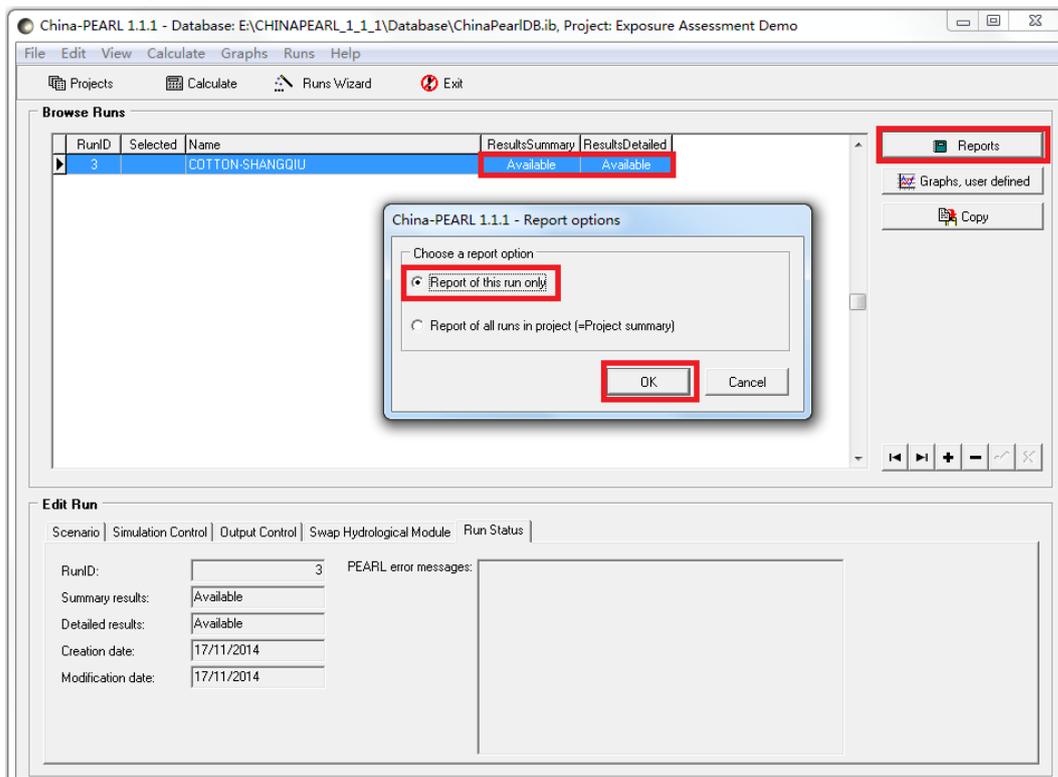


第八步:

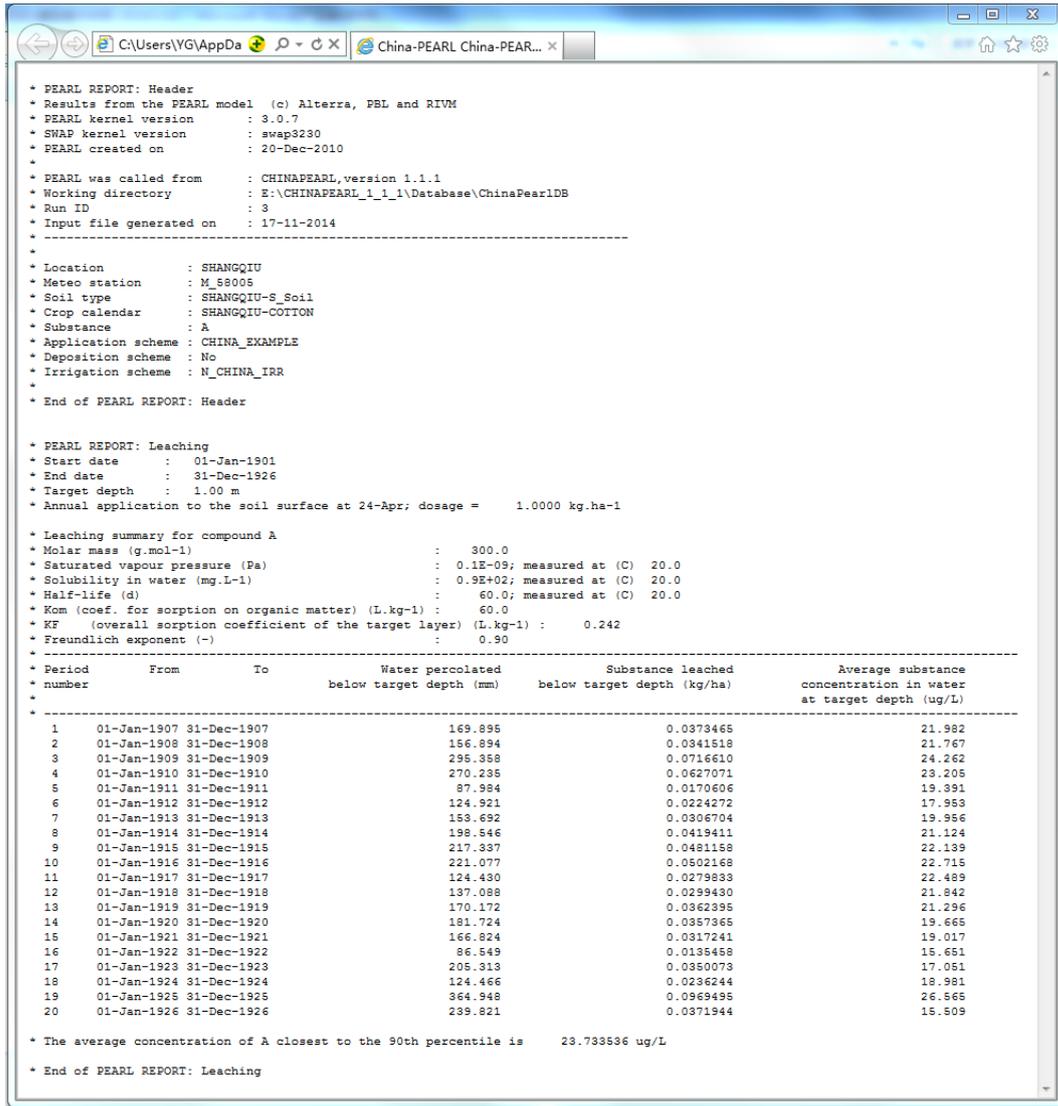
模型计算完成，在“ResultsSummary”和“ResultsDetailed”栏显示为“Available”；
单击“Reports”按钮查看计算结果；

选择“Report of this run only”；

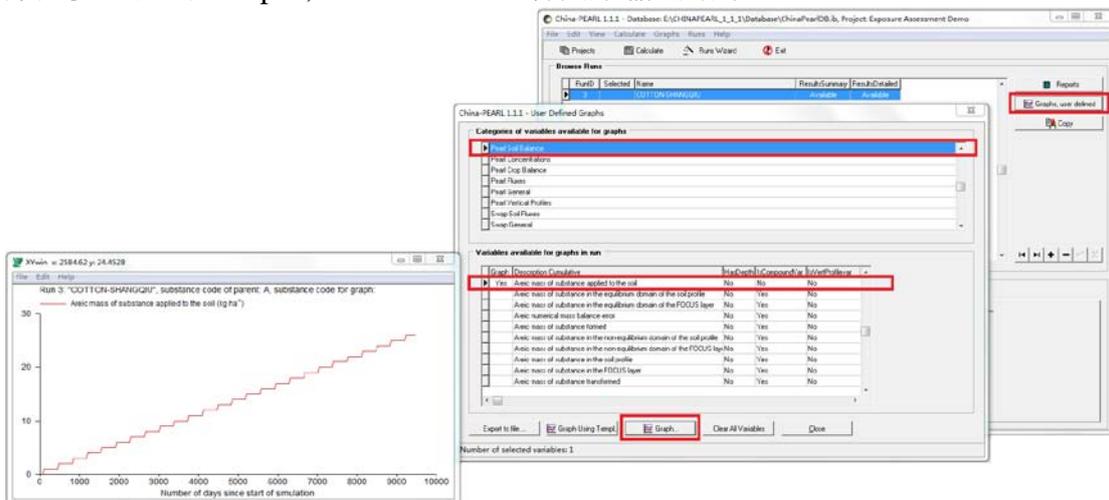
单击“OK”按钮。



模型输出结果见下图红框处



第九步：点击“Graphs, user defined”查看图形输出结果



附件 2: China-PEARL 模型的输入参数和输出值 (表 2-1)

表 2-1 China-Pearl 模型的输入参数和输出结果

Saturated vapour pressure	饱和蒸气压	Pa	需指明测定温度 (°C) 如温度未指明: 取 20 °C 如果有多个数值: 取算术平均数
Molar enthalpy of vaporisation	摩尔蒸发焓	kJ mol ⁻¹	默认值 = 95
Solubility in water	水中溶解度	mg L ⁻¹	需指明测定温度 (°C) 如温度未指明: 取 20 °C 如果有多个数值: 取算术平均数
Molar enthalpy of dissolution	摩尔溶解焓	kJ mol ⁻¹	默认值 = 27
2. 化合物界面-吸附选项卡 <i>Substances – sorption</i>			
Option	选项 (K _{om} , pH-independent; K _{om} , pH-dependent; K _f , user defined)	-	如果明确已知是 pH dependent, 可选“K _{om} , pH-dependent”; 如果不知道是否为 pH dependent, 选择“K _{om} , pH-independent”; 如果吸附依赖于其他土壤性质而不是土壤有机质, 选择“K _f , user defined”
平衡吸附 Equilibrium sorption			
If sorption is pH – independent:	如果为 pH 不依赖	-	选择 K _{om} , pH-independent
K _{om} soil (Coefficient of sorption on organic matter)	有机质吸附系数	L kg ⁻¹	需指明测定温度 (°C) 如温度未指明: 取 20 °C 如果有多个数值: 取几何平均数 K _{oc} 和 K _{om} 的换算公式: K _{om} = K _{oc} /1.724
If sorption is pH dependent:	如果为 pH 依赖		选择 K _{om} , pH-dependent
K _{om} soil (acid and base) (Coefficient of sorption on organic matter)	如果吸附属于 pH 依赖的情况: K _{om} 土壤 (酸性或碱性) (有机质吸附系数)	L kg ⁻¹	需指明测定温度 (°C) 如温度未指明: 取 20 °C 如果吸附属于 pH 依赖的情况但是没有 K _{om} 酸性和碱性存在, 那么: 选择 pH independent 并且: — 如果有标明 pH, 取土壤 pH 在 7 – 9 的 K _{om} — 如果没有标明 pH, 取数值最小的 K _{om}
pK _a , Acid dissociation	酸解离常数	无量	如果有多个数值: 取算术平均数

constant		纲	
pH correction	pH 校正因子	无量纲	
If sorption is dependent on other soil properties rather than the organic matter content	如果吸附依赖于其他土壤性质而不是土壤有机质	-	选择 Kf, user defined
K _f (Coefficient for sorption)	吸附系数	L kg ⁻¹	需指明测定温度 (°C) 如温度未指明: 取 20 °C
Molar enthalpy of sorption	摩尔吸附焓	kJ mol ⁻¹	默认值 = 0
Reference concentration in liquid phase	水相中的参考浓度	mg L ⁻¹	默认值 = 1
Freundlich sorption exponent [Note: in Pearl = N; in EU and Footprint = 1/n. these are identical!]	Freundlich 吸附指数 [注意: 在 China-PEARL 模型中用 N 表示; 而在欧盟以及 Footprint 数据库中以 1/n 表示, 但是它俩数值相等]	无量纲	存在多个数据时, 取算术平均值 如果没有数据, 取默认值= 0.9
非平衡吸附 Non-equilibrium sorption			
Desorption rate coefficient	解吸附速率系数	d ⁻¹	默认值 = 0
Factor relating CofFreNeq and CofFreEq	非平衡吸附中的 Freundlich 系数与平衡吸附中的 Freundlich 系数的比值	无量纲	默认值 = 0
3. 化合物界面-转化选项卡 Substances – transformation			
Half life (= Aerobic half life (DegT ₅₀) in soil)	半衰期 (=土壤好氧半衰期 (DegT ₅₀))	day	需指明测定温度 (°C) 如温度未指明: 取 20 °C 如果对不同土壤有多个数值: 取所有数值的几何平均数
Optimum moisture conditions (pF = 2 or wetter)	满足作物生长的最佳湿度条件 (pF = 2 或者更湿润)	-	默认选 yes
Liquid content in incubation	土壤降解试验中试验体系中的含水量	kg kg ⁻¹	如果勾选 Optimum moisture conditions (pF = 2 or wetter), 那么

experiment			默认值为 1，且此项变为不可编辑； 如果没有勾选 Optimum moisture conditions，需要用户指定数值
Exponent for the effect of liquid	液体影响指数	无量纲	默认值 = 0.7
Molar activation energy	摩尔活化能	kJ mol ⁻¹	默认值 = 65.4
If metabolite is formed: Transformation scheme: fraction transformed	如果有代谢物形成： 降解途径：转化率	无量纲 (0-1 之间)	指明母体化合物转化为代谢物的转化率
4. 化合物界面—扩散选项卡 Substances – diffusion			
Reference temperature for diffusion	扩散参考温度	°C	默认值 = 20
Reference diffusion coefficient in water	水中参照扩散系数	m ² d ⁻¹	默认值= 4.3×10 ⁻⁵
Reference diffusion coefficient in air	空气中参照扩散系数	m ² d ⁻¹	默认值= 0.43
5. 化合物界面-作物选项卡 Substances– crop			
Canopy processes	叶面参数	-	-
Wash-off factor	冲刷因子	m ⁻¹	默认值= 0.0001
Canopy process option	叶面选项	-	默认值 = lumped Lumped (视为等同的) Specified (需要分别指定在叶面渗透、降解和挥发的半衰期)
Lumped: half-life at crop surface	视为等同情况下： 作物叶面半衰期	d	默认值= 10
Specified: half-life due to penetration	特指：叶面渗透半衰期	d	默认值= 10
Specified: half-life due to volatilization	特指：叶面降解半衰期	d	默认值= 10

Specified: half-life due to transformation	特指：叶面挥发半 衰期	d	默认值= 10
Root processes	根系参数	-	-
Coefficient of uptake by plant	农药从根系被作物 吸收的系数	dim ensi onl ess	默认值= 0.5
6. 施药方案选项卡 Application Scheme			
Absolute applications	按绝对施药时间 施药	-	适用于苹果、葡萄、苜蓿
Application type	施药方式		共有五个选项： 1、叶面喷雾，由模型计算拦截系数（To the crop canopy, interception fraction calculated by the model） 2、叶面喷雾，由用户指定拦截系数（To the crop canopy, interception fraction calculated by the user） 3、土壤注射（Injection） 4、土壤表面喷雾（To the soil surface） 5、拌土等土壤处理或种衣剂（Incorporation）
如果选择“to the crop canopy, interception specified by the user”用户需指 定拦截系数	-	无量纲	-
如果选择 “Injection” 或 “Incorporation” , 用户需指定 土壤深度	-	m	默认值=0.05
Date	绝对施药时间	(dd/mm /yyyy)	年份需填为 1901（模型中虚拟的起始年份）
Dosage	施药剂量	kg <u>acti</u> <u>ve</u> <u>subst</u> <u>ance</u> ha ⁻¹	-
Relative application	按相对施药时间 施药	-	适用于除苹果、葡萄、苜蓿之外的其他作物
Crop event	作物生长阶段	-	可根据施药时间选择“Emergence”或“Harvest”
Application	施药方式	-	共有四个选项可对应实际五类施药

type			方式： 1、叶面喷雾，由模型计算拦截系数（To the crop canopy, interception fraction calculated by the model） 2、叶面喷雾，由用户指定拦截系数（To the crop canopy, interception fraction calculated by the user） 3、土壤注射（Injection） 4、土壤表面喷雾（To the soil surface） 5、拌土等土壤处理或种衣剂（Incorporation）
如果选择“to the crop canopy, interception specified by the user”用户需指定拦截系数	-	无量纲	-
如果选择“Injection”或“Incorporation”，用户需指定土壤深度	-	m	默认值=0.05
Period (days) before or after event	在作物生长阶段前后的天数	-	在作物生长阶段前 X 天（负数）； 在作物生长阶段后 X 天（正数）
Dosage	施药剂量	kg active substance ha ⁻¹	根据农药标签确定，选择最大的施药剂量
Crop number	作物数	number season ⁻¹	
7.输出结果 Report			
The average concentration of XXX closest to the 90th percentile is	XXX 在地下水中 90 百分位的浓度	μg L ⁻¹	报告中出现 90 百分位表示的是在 90 百分位土壤脆弱性的基础上叠加的 90 百分位的气象脆弱性的结果。

参考文献

- Boesten, J.J.T.I. 1986. Behavior of pesticides in soil: Simulation and experimental assessment. Ph.D.thesis, Wageningen Agricultural University, Wageningen, the Netherlands.
- Boesten, J.J.T.I. 1991. Sensitivity analysis of a mathematical model for pesticide leaching to groundwater. *Pestic. Sci.* (31):375-388.
- Boesten, J.J.T.I. 2000. Modeler subjectivity in estimating pesticide parameters for leaching models using the same laboratory data set. *Agric. Water Mgmt.* (44):389-409.
- Boesten, J.J.T.I., and A.M.A. van der Linden. 1991. Modeling the influence of sorption and transformation on pesticide leaching and persistence. *J. Environ. Qual.* (20):425-435.
- Kroes, J.G., J.C. Van Dam, P. Groenendijk, R.F.A. Hendriks, C.M.J. Jacobs. 2008. *SWAP version 3.2. Theory description and user manual. Alterra-report 1649. Wageningen-UR, Alterra, Wageningen*
- Leistra, M., A.M.A. van der Linden, J.J.T.I. Boesten, A. Tiktak and F. van den Berg. 2000. PEARL model for pesticide behaviour and emissions in soil-plant systems. Description of processes in FOCUS PEARL v 1.1.1. Alrterra report 013, Alterra, Wageningen, the Netherlands.
- Ter Horst, M.M.S. Wipfler, E. L., Adriaanse, P. I., Boesten, J.J.T.I., Fait, G., Li Wenjuan, Tao Chuanjiang, *Chinese scenarios for groundwater leaching and aquatic exposure. Alterra-report 2559, Wageningen-UR, Alterra, Wageningen*
- Tiktak, A., A.M.A. van der Linden and R.C.M. Merkelbach. 1996b. *Modeling pesticide leaching at a regional scale in the Netherlands.* RIVM report no. 715801008, Bilthoven, the Netherlands.
- Tiktak, A., F. van den Berg, J.J.T.I. Boesten, M. Leistra, A.M.A. van der Linden and D. van Kraalingen. 2000. Pesticide Emission Assessment at Regional and Local Scales: User Manual of FOCUS Pearl version 1.1.1. RIVM Report 711401008, Alterra Report 28, RIVM, Bilthoven, 142 pp.
- Van Dam, J.C., J. Huygen, J.G. Wesseling, R.A. Feddes, P. Kabat, P.E.V. van Walsum, P. Groenendijk and C.A. van Diepen. 1997. *Theory of SWAP version 2.0. Simulation of water flow, solute transport and plant growth in the Soil-Water-Atmosphere-Plant environment.* SC-DLO technical document 45, Wageningen, The Netherlands, pp. 167.
- Van Heerden and Tiktak, 1994
- Peter J. Vaughan and Dennis L. Corwin. 1994. A method of modeling vertical fluid flow and solute transport in a GIS context. *Geoderma* 64 (1-2), pp. 139-154

Walker, A. 1974. A simulation model for prediction of herbicide persistence. *J. Environ. Qual.* (3):396-401.