

# **TOP-RICE 模型操作手册**



# 目录

前言	1
TOP-RICE模型原理简介	2
1 TOP-RICE模型用户界面的操作指南	7
1.1 数据库概述	7
1.2 启动	8
1.3 生成模型运行	8
1.3.1 创建或编辑项目	8
1.3.2 创建或编辑化合物	9
1.3.3 创建或编辑一个或多个农药施药方案	9
1.3.4 添加或编辑一条运行条目	9
1.3.5 改进	10
1.3.6 运行TOP-RICE模型	10
1.3.7 查看运行结果	10
1.4 TOP-RICE用户界面的常规属性	10
1.5 项目界面	11
1.6 主界面	12
1.7 编辑化合物信息	13
1.7.1 编辑化合物	13
1.7.2 农药代谢物界面	18
1.8 编辑农药施药方案	19
1.9 运行模型	20
1.10 模型输入参数和输出结果	20
1.10.1 TOP-RICE模型输入参数	20
1.10.2 TOP-RICE模型输出结果	23
1.11 模型安装与技术支持	24
参考文献和背景资料	27



# 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。TOP-RICE模型（TOXSWA+Paddy-PEARL）是一种计算机模型，用于中国南方地下水和地表水场景中，预测农药淋溶至地下水以及通过地表漫溢径流注入天然池塘后两种水体中该农药的暴露浓度。TOP-RICE模型由TOXSWA和Paddy-PEARL模型组成，TOXSWA模型是一个伪2维模型，描述了农田边界区域范围内农药在地表水及其底层沉积物中的环境行为；Paddy-PEARL模型是一个一维模型主要用于预测农药淋溶至地下水中的暴露浓度。

《TOP-RICE模型操作手册》（以下简称《手册》）是TOP-RICE模型的用户界面操作手册，共10个章节，包含模型的背景信息和数据库知识，在正文部分将对模型界面的所有视窗进行介绍。《手册》1.1章节将对TOP-RICE模型数据库进行详细阐述；1.2章节将阐述如何启动模型；1.3章节解释如何生成运算；用户界面的主要信息将在1.4章节进行阐述；1.5-1.8章节将介绍模型的项目界面和主界面的详细信息，包括场景点选择、化合物编辑以及农药施用方案等。1.9章节将介绍TOP-RICE模型的操作步骤。1.10章节将简要介绍模型输入参数和输出结果。1.11章节将介绍TOP-RICE模型的安装方法。对于每个模型操作界面，均先介绍其中各种参数的意义和默认值，并且都有截图供读者参考。

《手册》是针对TOP-RICE模型的第一本用户使用手册，适用的模型版本为TOP-RICE\_2\_CN。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

# TOP-RICE模型原理简介

TOP-RICE模型是中国南方水稻田地下水、地表水暴露模型。该模型内嵌水文学模型SWAP、水田农药归趋模型Paddy-PEARL和天然池塘农药归趋模型TOXSWA。SWAP模型用于模拟稻田水-土壤-地下水系统中土壤、水流和热传导过程（图A）。Paddy-PEARL模型主要用于模拟水稻田中稻田水-土壤-地下水系统中农药的吸附、运移、转化等过程；TOXSWA模型用于模拟农药漫溢径流至池塘后水在池塘中的运移以及农药在池塘系统中的吸附、运移、转化过程。三个模型经用户界面集成后组成TOP-RICE模型。

## 1、概念模型

根据我国南方稻田及周边地表水水体情况的调研，项目专家组建立的我国南方稻田地表水场景信息如下：自然池塘面积为1亩，其周围相邻的水稻田为20亩，稻田每年种植两季水稻——早稻和晚稻，且早稻收获后马上种植晚稻。稻田部分的水文过程包括：降雨、灌溉、稻田水表面蒸发、水稻叶面蒸腾、稻田水下渗至土层或穿过田埂或沿田埂底部侧漏。稻田水水位在1-10cm之间浮动，低于1cm时，自动启动灌溉，高于10cm时产生外溢径流（Runoff overflow）流入天然池塘（图1.1）。水稻分蘖期间期间和水稻收获前2天，排干田水，田水流入天然池塘。

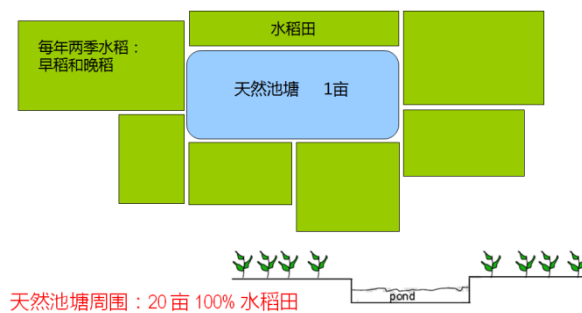


图 1.1 我国南方水稻田-池塘体系概念模型

## 2、水文学过程和农药环境行为

在中国南方地下水和地表水场景中，TOP-RICE模型预测农药淋溶至地下水的浓度，以及通过地表漫溢径流注入天然池塘后塘水中该农药的暴露浓度。在TOP-RICE模型中，对水稻田土壤-作物系统中土壤、水流和热传导过程均可进行模拟。

农药施药后在土壤、天然池塘的悬浮颗粒物对农药的吸附将使用Freundlich 吸附公式模拟。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，降解形式主要包含好氧降解和厌氧降解，同时模型也考虑到土壤湿度条件和土壤深度对农药土壤降解的影响。农药在水中（稻田水和天然池塘水中）的降解（水解）

也按照Arrhenius公式进行描述，为一级反应动力学。此外，模型中也包括农药在水稻叶面降解过程。

TOP-RICE模型可以模拟田水漫溢径流注入天然池塘中的农药浓度。模型模拟的天然池塘系统是一个二维系统，并且包含两个子系统，水层和沉积物层。目前TOP-RICE模型只计算水层中农药的浓度，图1.2和1.3分别描述了TOP-RICE模型中稻田概念模型、模拟的稻田-池塘水文情况以及在稻田-池塘体系农药的环境行为。

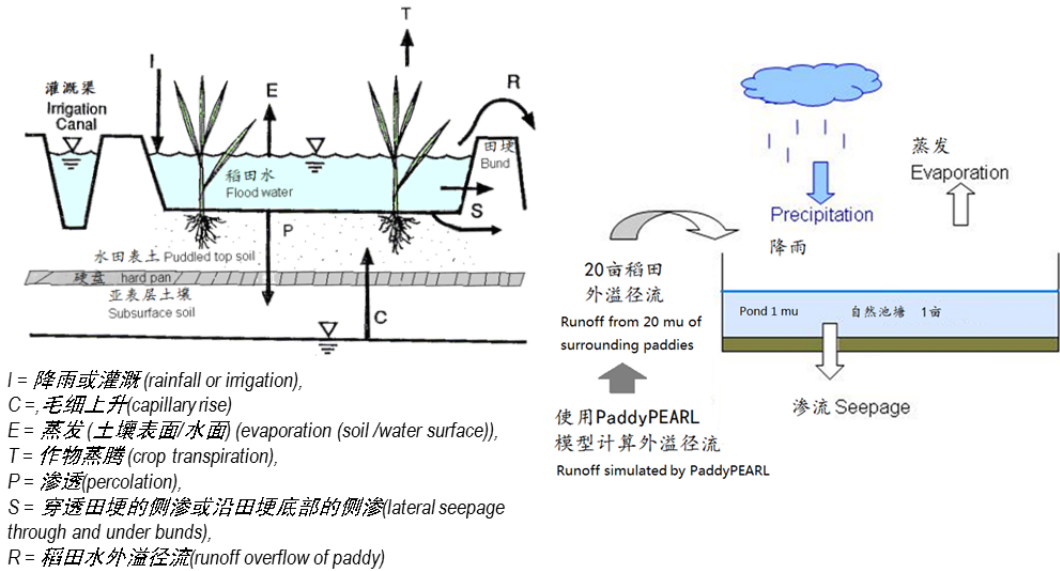


图1.2 TOP-RICE模型中模拟的水文学过程

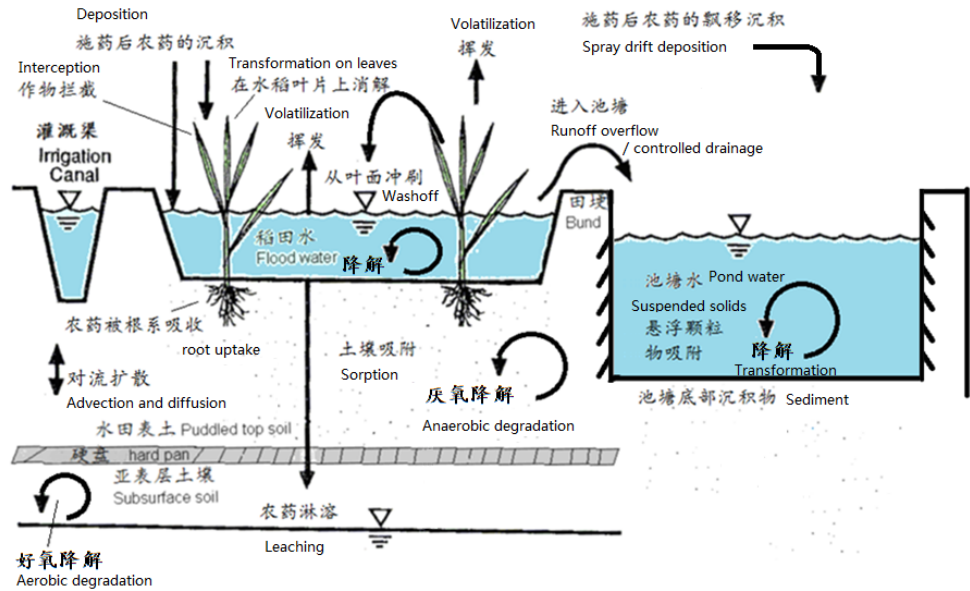


图1.3 TOP-RICE模型中模拟的农药环境行为

为了评价农药的使用对环境产生的风险以及完善中国的农药登记审批程序，我们借鉴了欧盟建立的标准场景的概念。众所周知，中国气候多样、土壤类型复杂、地形多变，这些事实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、土壤和地形等因素的影响。考虑到这些差异对农药环境风险评估的影响，我们把中国划分为6个场景区。对于每个场景区，我们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1.4所示。长江流域场景区和华南场景区都是水稻田场景区。

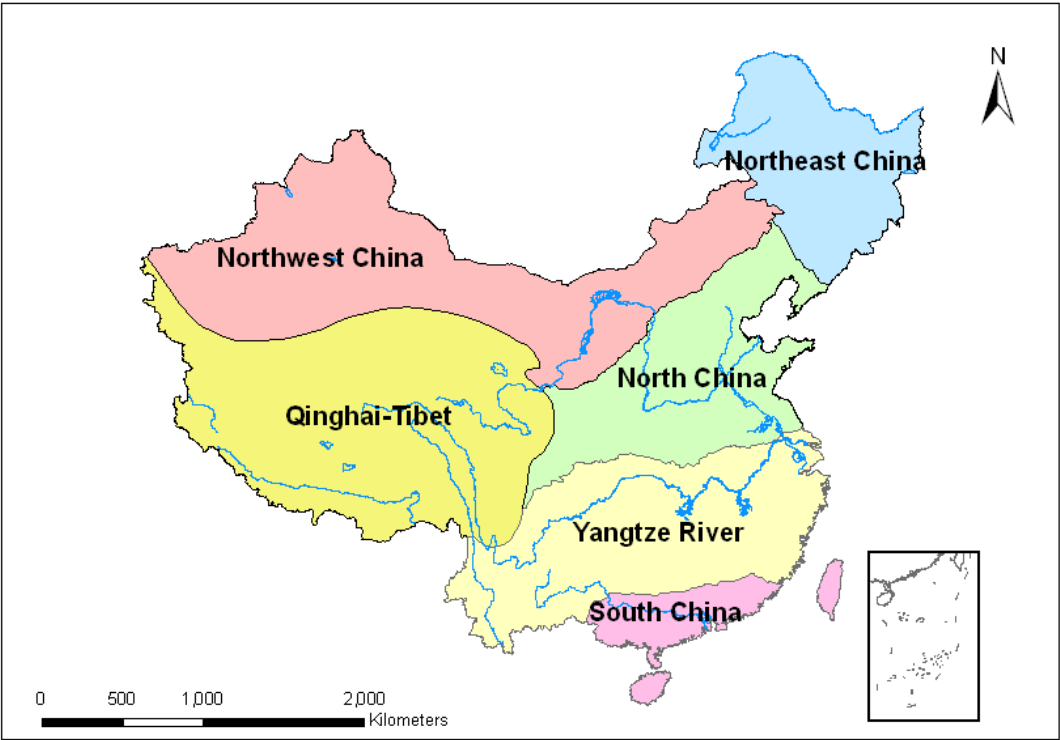


图1.4中国不同场景区

场景点应当代表所有地下水第99百分位的情况（代表现实中最糟糕的情况）和所有地表水中第90百分位数的情况。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。在场景设计中用第10百分位的土壤有机质含量代表第90百分位的土壤性质。用多年气象数据模拟第90百分位的气象条件。对于长江流域地区第90百分位的年平均降雨是2020mm；对于华南地区第90百分位的年平均降雨是2050mm。分别选择年平均降雨量在2020mm或者2050mm且在累计概率密度函数图形的中央（即第x百分位数）的具体地点作为长江流域地区或华南地区的备选场景点，模型将模拟20年的数据，计算出第x百分位数的年平均淋溶至地下水的浓度用来代表总体上考虑了土壤和气候脆弱性因素后的第99百分位的淋溶浓度。



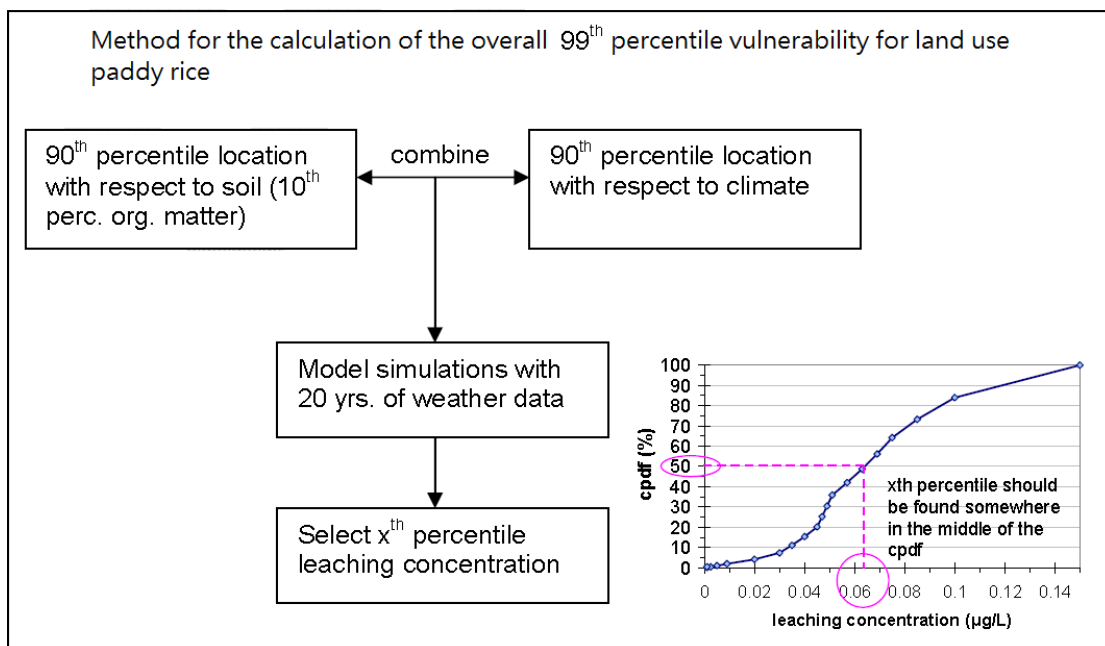


图1.5.水稻田地下水场景整体第99百分位脆弱性的计算方法

对于地表水场景，第90百分位的气象因素近似用第90百分位的降雨来表示。对于第90百分位的降雨是通过多年降雨数据模拟获得（图1.5）。

在长江流域场景区和华南场景区，选择出两个场景点来分别代表两个场景区的第10百分位的土壤有机质含量和第90百分位的降雨（图1.6和表1.1）。在长江流域场景区和华南场景区，水稻田地下水场景选择的场景点与地表水场景点相同。

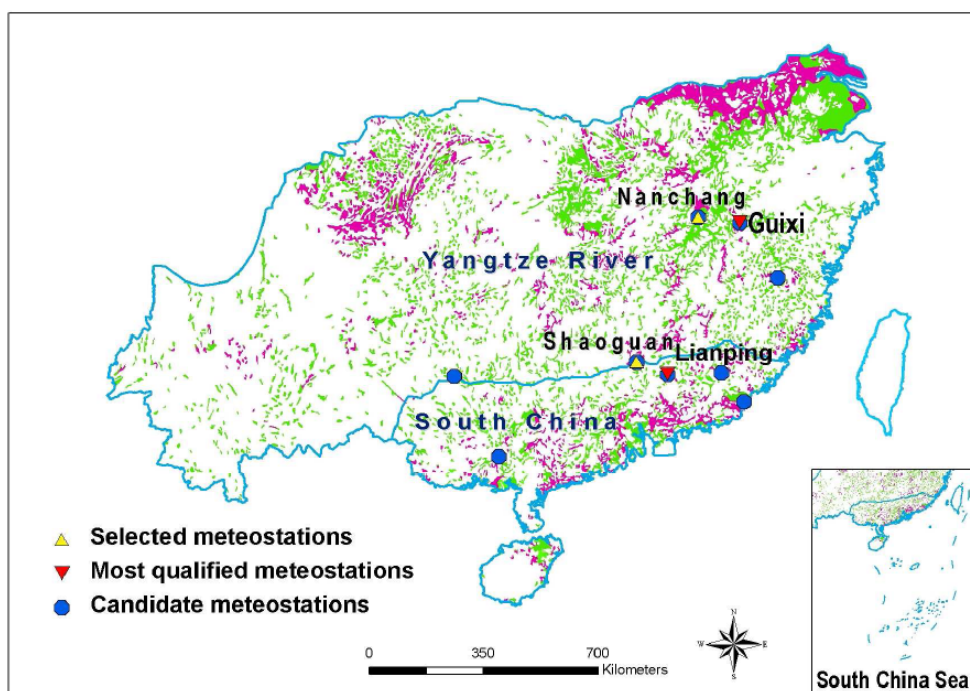


图1.6在长江流域场景区和华南场景区中水稻田地下水 and 地表水场景点

表 1.1 在长江流域场景区和华南场景区中水稻田地下水和地表水场景点

场景区	场景点名称	所在省	年平均降雨 (mm)	年平均温度 (℃)	有机质含量分类 (%)
长江流域地区	南昌	江西	1624	17.6	1 - 2
华南地区	连平	广东	1805	19.91	1 - 2

# 1 TOP-RICE模型用户界面的操作指南

本部分将对TOP-RICE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TOP-RICE模型。用户操作界面与一个关系数据库相连，便于数据访问。用户界面生成的TOP - Rice模型输入文件，并调用模型。简要的输出结果会调回TOP-RICE数据库，可以在用户界面访问。通过使用TOP-RICE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。

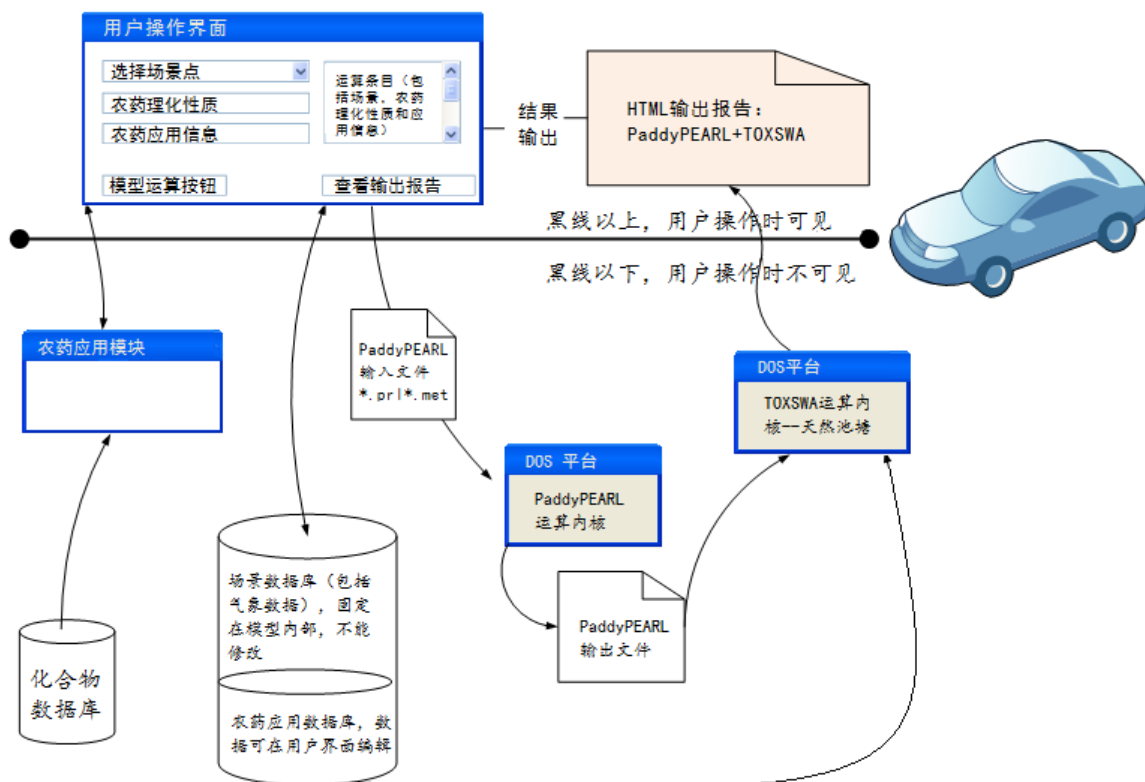


图1. TOP-RICE模型系统操作原理概览

## 1.1 数据库概述

在初级风险评估中模型将与标准场景配合使用。目前包括南昌和连平两个标准场景点，作物为水稻（双季稻）。模型中内嵌了两个数据库，其一包含化合物理化性质和环境行为数据，其二包含了场景和农药使用信息。化合物数据可分为基础数据、吸附数据（土壤、水中悬浮颗粒物）、转化数据（土壤、水和沉积物）以及作物过程。PERAP模型工作组定义的场景点是由作物信息、地理信息（包括土壤参数、气象参数、用于描述地下水区域和天然池塘系统的参数）、农事操作参数（特别指灌溉数据）组成。所有的场景信息都已经固化在模型中，用户不能修改。农药使用数据描述了农药施药情况，包括施药方式、施药量、施药时间和喷雾飘移沉降率等。

## 1.2 启动

现在打开TOP-RICE用户界面（打开开始菜单，然后选择所有程序，最后选择TOP-RICE）。接下来我们将介绍如何通过运行TOP-RICE模型来实现中国农药登记程序--初级暴露评估方法，生成TOP-RICE运行条目。

## 1.3 生成模型运行

TOP-RICE模型支持目标数量以及PERAP项目组制定的场景。为了生成运行条目，按图2所示进行。

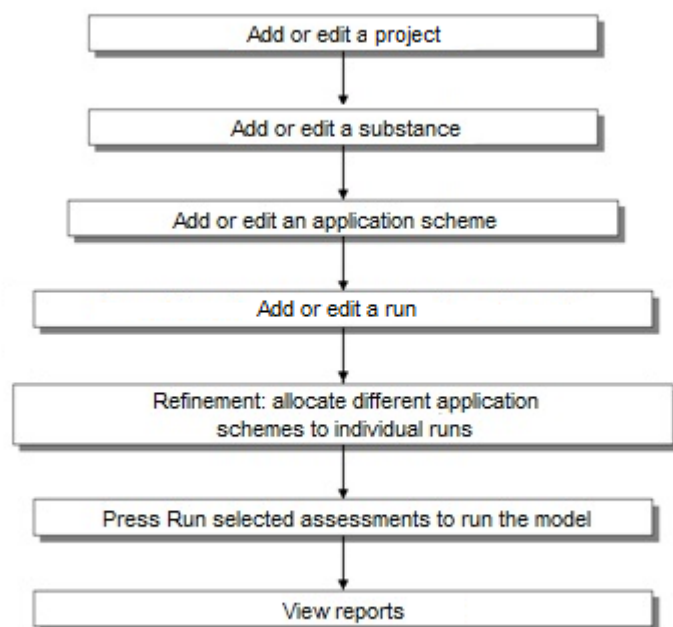


图2.生成运行条目的步骤



### 1.3.1 创建或编辑项目

请参照下述步骤创建一个新项目：

1. 单击主菜单上方的“Projects”按钮  进入项目管理界面；
2. 单击导航区按钮  ；
3. 在“Edit Projects”填入标题Caption、描述Description以及备注Comment；
4. 单击导航区的按钮  保存修改；
5. 保存后，单击Open按钮回到主界面。

### 1.3.2 创建或编辑化合物

请参照下述步骤创建一个新化合物：

1. 单击主界面的评估项目框的右侧组合框中Substance旁的浏览按钮进入到化合物数据界面
2. 单击导航区的按钮；
3. 至少填写以下化合物参数：

在常规选项卡(General)，指定化合物代码SubstanceCode、名称Name、摩尔分子量Molar mass、饱和蒸气压Saturated vapour pressure以及水中溶解度Solubility in water。





在吸附(Sorption)选项卡中土壤吸附（Soil）和水体中悬浮固体颗粒物吸附（Water）选项卡中，需要给出化合物的有机质吸附系数。

在转化选项卡（Transformation），需要给出化合物在土壤、稻田水和天然池塘水中的降解半衰期。

4. 完成编辑后，单击关闭(Close)按钮回到主菜单。


### 1.3.3 创建或编辑一个或多个农药施药方案



请参照下述步骤创建一个农药施药方案：

1. 单击主界面的评估项目框的右侧组合框Application schemes中的浏览按钮进入到农药施药数据界面；
2. 单击农药施药方案对话框（Application schemes）的导航区中的按钮（在总框图的左边）；
3. 填入标题Caption、描述Description；
4. 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；
5. 填入施药方式Application type、施药量Dosage、施药时间Application date、喷雾飘移沉积率SprayDrift；
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。
7. 保存后，单击Close按钮回到主界面

### 1.3.4 添加或编辑一条运行条目

通过以下步骤创建一条新的评估条目：


1. 单击导航区的按钮以添加一条新条目（主界面的右边）；
2. 填入标题Caption、描述Description；
3. 选择一个场景点Scenario、一种化合物Substance以及一种使用方案ApplicationScheme；
4. 请注意对于每条评估条目，你只能选择一种使用方案以及一种化合物；

5. 在状态窗口的选择执行选项（Selected）上打钩；
6. 单击导航区的按钮来保存条目；
7. 你可以使用拷贝按钮复制一个已经存在的条目，当你只想更改场景点时，这样操作很方便。

### 1.3.5 改进

现在TOP-RICE模型已经在一个项目中生成了多个评估条目。你将看到该项目中所有的评估条目都被打钩选中等待执行。你可以通过在“Selected”列中双击鼠标左键来定义执行或不执行该条目。


### 1.3.6 运行TOP-RICE模型

单击计算选择的评估条目Calculate按钮来运行模型：

1. 全部所选条目都将运行
2. TOP-RICE用户界面将写入输入文件并且调用模拟计算内核。
3. 你可以追踪整个模拟过程。

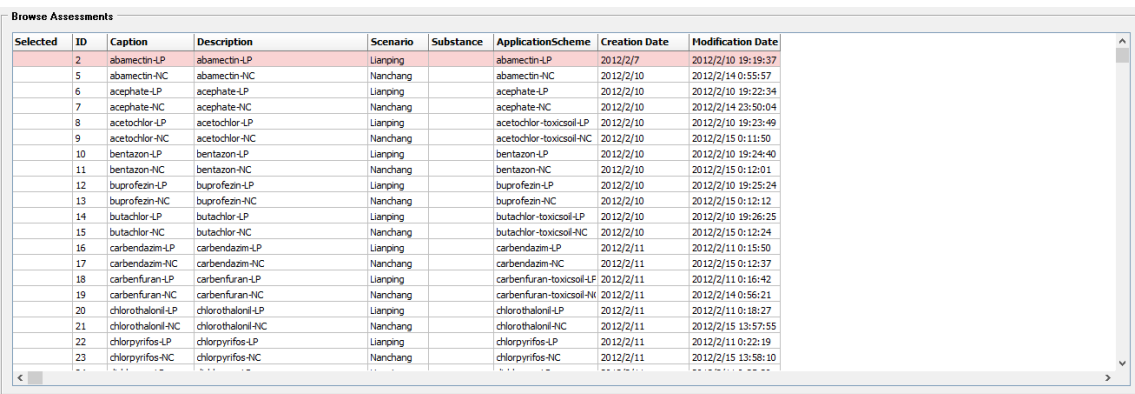
如果有错误出现，用户可以从主界面的状态选项卡中看到错误信息。

### 1.3.7 查看运行结果

单击评估报告Assessment report按钮来查看总结报告，该报告包含：第77百分位（南昌）和第89百分位（连平）的农药淋溶浓度和天然池塘中的峰值浓度（分别代表整体第99百分位脆弱性的地下水场景和第90百分位脆弱性的天然池塘场景）。

## 1.4 TOP-RICE 用户界面的常规属性








TOP-RICE模型用户界面的所有界面都有一个相似的设置，本手册将会用评估条目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（图3），（2）编辑框（图4）。



Selected	ID	Caption	Description	Scenario	Substance	ApplicationScheme	Creation Date	Modification Date
<input checked="" type="checkbox"/>	2	abamectin-LP	abamectin-LP	Lianping		abamectin-LP	2012/2/7	2012/2/10 19:19:37
<input checked="" type="checkbox"/>	5	abamectin-NC	abamectin-NC	Nanchang		abamectin-NC	2012/2/10	2012/2/14 0:55:57
<input checked="" type="checkbox"/>	6	acephate-LP	acephate-LP	Lianping		acephate-LP	2012/2/10	2012/2/10 19:22:34
<input checked="" type="checkbox"/>	7	acephate-NC	acephate-NC	Nanchang		acephate-NC	2012/2/10	2012/2/14 23:50:04
<input checked="" type="checkbox"/>	8	acetochlor-LP	acetochlor-LP	Lianping		acetochlor-toxicsoil-LP	2012/2/10	2012/2/10 19:23:49
<input checked="" type="checkbox"/>	9	acetochlor-NC	acetochlor-NC	Nanchang		acetochlor-toxicsoil-NC	2012/2/10	2012/2/15 0:11:50
<input checked="" type="checkbox"/>	10	bentazon-LP	bentazon-LP	Lianping		bentazon-LP	2012/2/10	2012/2/10 19:24:40
<input checked="" type="checkbox"/>	11	bentazon-NC	bentazon-NC	Nanchang		bentazon-NC	2012/2/10	2012/2/15 0:12:01
<input checked="" type="checkbox"/>	12	buprofezin-LP	buprofezin-LP	Lianping		buprofezin-LP	2012/2/10	2012/2/15 0:12:24
<input checked="" type="checkbox"/>	13	buprofezin-NC	buprofezin-NC	Nanchang		buprofezin-NC	2012/2/10	2012/2/15 0:12:12
<input checked="" type="checkbox"/>	14	butachlor-LP	butachlor-LP	Lianping		butachlor-toxicsoil-LP	2012/2/10	2012/2/10 19:26:25
<input checked="" type="checkbox"/>	15	butachlor-NC	butachlor-NC	Nanchang		butachlor-toxicsoil-NC	2012/2/10	2012/2/15 0:12:24
<input checked="" type="checkbox"/>	16	carbendazim-LP	carbendazim-LP	Lianping		carbendazim-LP	2012/2/11	2012/2/11 0:15:50
<input checked="" type="checkbox"/>	17	carbendazim-NC	carbendazim-NC	Nanchang		carbendazim-NC	2012/2/11	2012/2/15 0:12:37
<input checked="" type="checkbox"/>	18	carbenfuran-LP	carbenfuran-LP	Lianping		carbenfuran-toxicsoil-LP	2012/2/11	2012/2/11 0:16:42
<input checked="" type="checkbox"/>	19	carbenfuran-NC	carbenfuran-NC	Nanchang		carbenfuran-toxicsoil-NC	2012/2/11	2012/2/14 0:56:21
<input checked="" type="checkbox"/>	20	chlorothalonil-LP	chlorothalonil-LP	Lianping		chlorothalonil-LP	2012/2/11	2012/2/11 0:18:27
<input checked="" type="checkbox"/>	21	chlorothalonil-NC	chlorothalonil-NC	Nanchang		chlorothalonil-NC	2012/2/11	2012/2/15 13:57:55
<input checked="" type="checkbox"/>	22	chlorpyrifos-LP	chlorpyrifos-LP	Lianping		chlorpyrifos-LP	2012/2/11	2012/2/11 0:22:19
<input checked="" type="checkbox"/>	23	chlorpyrifos-NC	chlorpyrifos-NC	Nanchang		chlorpyrifos-NC	2012/2/11	2012/2/15 13:58:10

图3.浏览框

浏览框允许用户滚动鼠标浏览所有记录（在此指评估条目）。你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
-  删除记录
-  添加一条新（空白）记录
-  确认修改（“之前编辑的内容”）
-  取消修改
-  到达表中的最后一条记录
-  拷贝记录

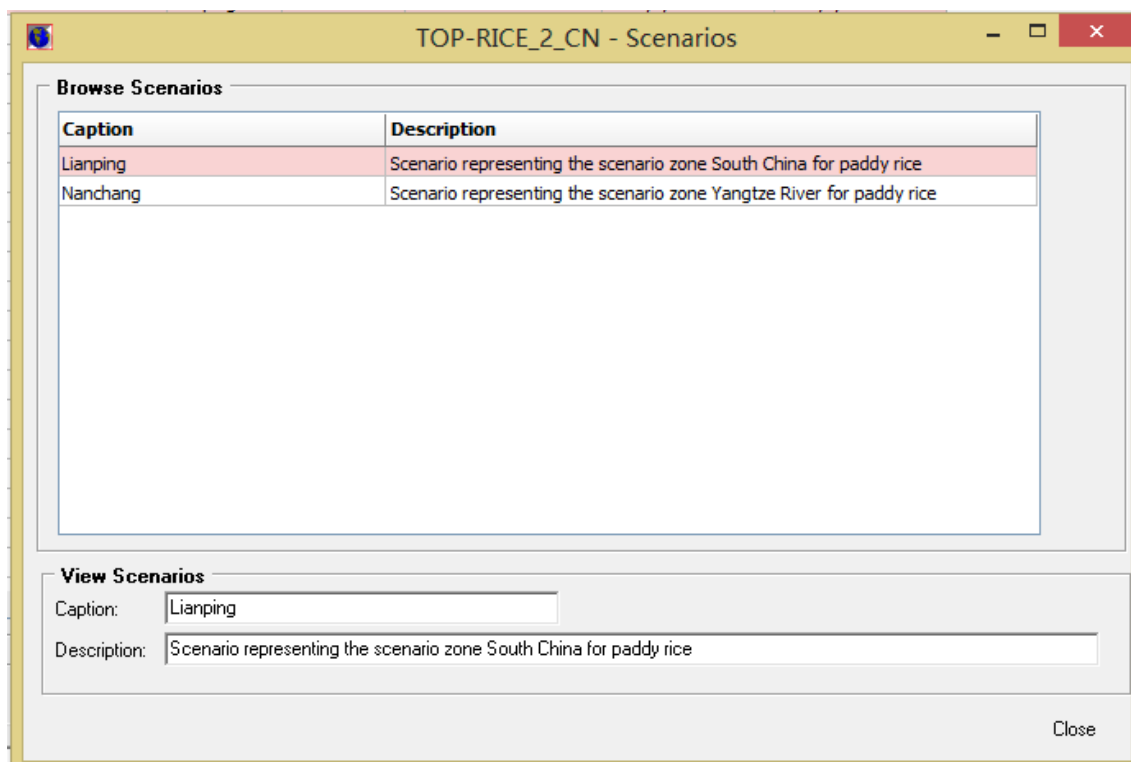


图4. 编辑窗口

## 1.5 项目界面

从主界面可以到达项目界面。项目界面（图5）允许用户组织数据。可以在浏览框中选择已经建立好的项目。导航区允许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。

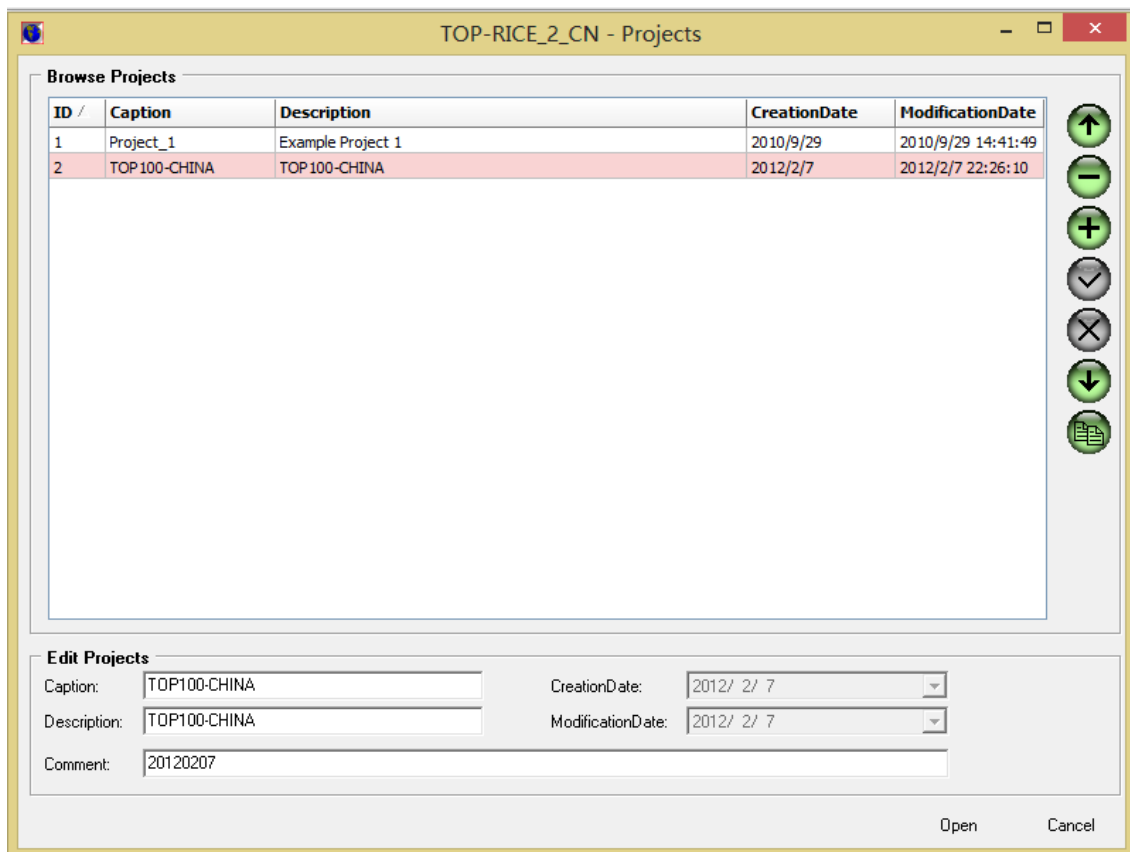


图5.TOP-RICE 模型用户界面之项目界面

## 1.6 主界面

该界面是模型界面的中心部分，用户可以从主界面（图6）到达任意想到达的不同界面，用以编辑数据库、运行评估条目以及查看评估报告。在1.3节已经描述的基本操作步骤将在此界面加以显示。用户可以使用按钮，主菜单或者快捷键来浏览用户界面。



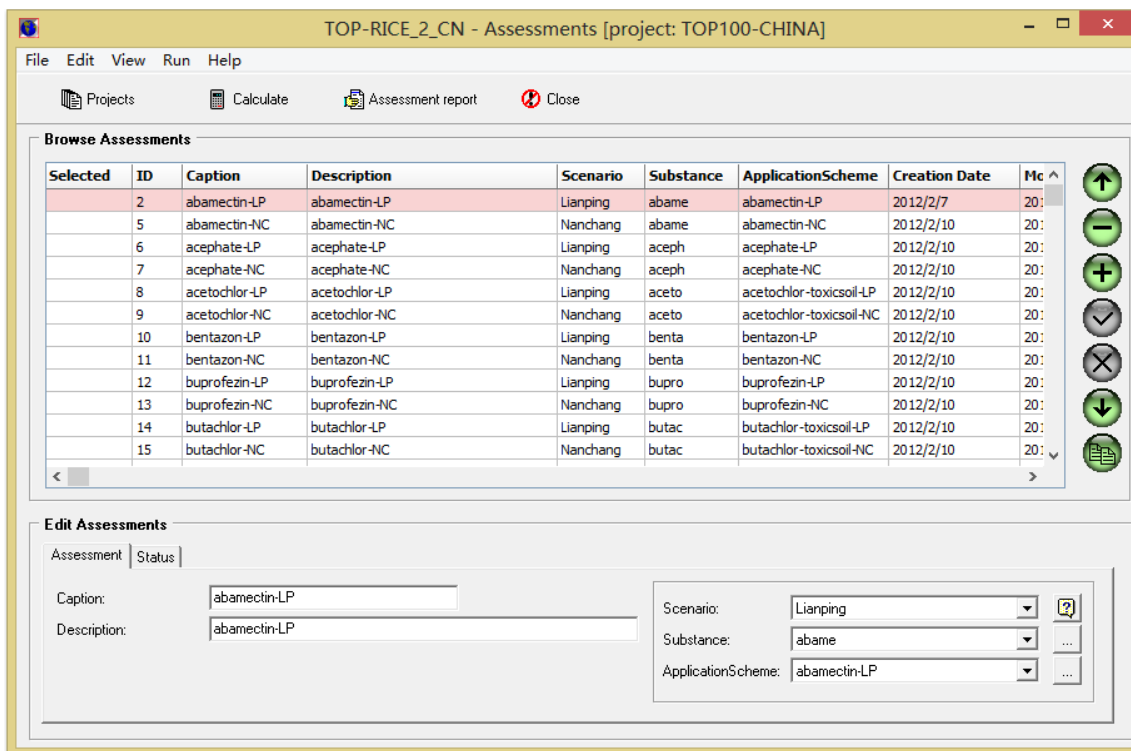



图6. TOP-RICE用户界面之主界面

## 1.7 编辑化合物信息

从主界面可以到达化合物界面。TOP-RICE模型可以模拟农药母体及其代谢产物在土壤的环境行为以及农药母体在池塘水-悬浮颗粒物系统中的环境行为。这就要求对单个化合物的理化性质及其转化途径数据（transformation scheme）进行参数化。这两种参数化过程都可以在化合物界面实现。输入数据必须按以下顺序进行：

- 定义单个化合物的理化性质
- 定义转化途径。如果只需要模拟化合物的母体，不考虑代谢物，则该步骤可以忽略。

所有化合物的理化性质数据都存储在化合物数据库中。用户可以将一个化合物通过  中转化率定义为另一个化合物的代谢物。

### 1.7.1 编辑化合物

化合物界面共有4个选项卡，详见下文。

#### 常规选项卡General

在这一选项卡（图7）中，用户可以填写化合物的基本理化性质参数。化合物代码 SubstanceCode 以及化合物名称（Name）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（Molar mass）。TOP-RICE模型还需填写饱和蒸汽压（Saturated vapour pressure），并且定义测量温度（如果缺失可使用参考值25℃）；农药水中溶解度（Solubility in water），并且定义测量温度（如果缺失可使用参考值20℃）。摩尔蒸发焓（Molar enthalpy of vaporisation）的默认值为95kJ/mol，摩尔溶解焓（Molar enthalpy of dissolution）的默认值为27kJ/mol，水中参照扩散系数（Reference diffusion coefficient in water）

的默认值为 $4.3\text{E-}5\text{ m}^2/\text{d}$ ，空气中参照扩散系数（Reference diffusion coefficient in air）的默认值为 $0.43\text{ m}^2/\text{d}$ ，默认参考温度为 $20^\circ\text{C}$ 。

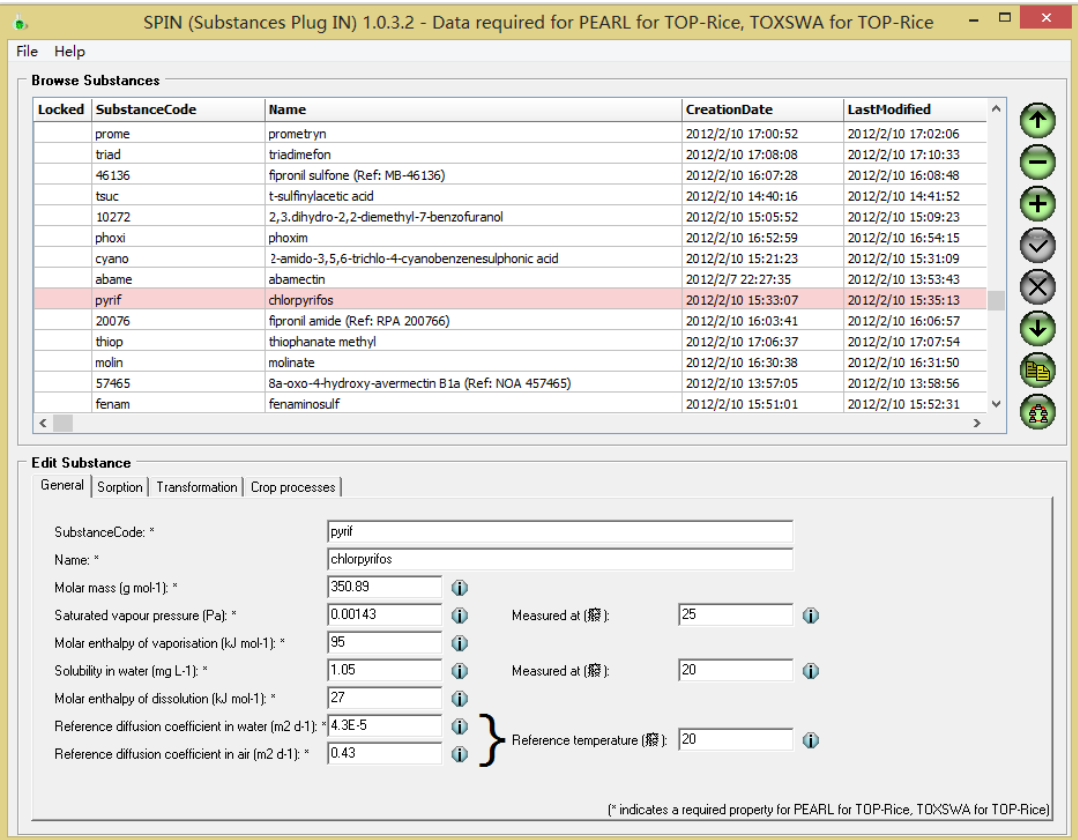


图7.化合物界面

吸附选项卡

化合物在土壤和水中悬浮颗粒物中的吸附过程通过Freundlich 吸附公式描述。

1) 土壤吸附选项卡包括平衡吸附和非平衡吸附两部分（图8）。其中参数包括：

- 土壤吸附系数（ $K_{om}$ , pH-independent）；
- 水相参考浓度（Reference concentration in liquid phase）；
- 摩尔吸附焓（Molar enthalpy of sorption）；
- Freundlich 吸附指数（Freundlich sorption exponent）；
- 非平衡解吸附速率常数（Desorption rate coefficient in Non-equilibrium sorption）；
- 非平衡吸附与平衡吸附中Freundlich系数的相关系数（Factor relating Freundlich coefficient for non-equilibrium sorption and equilibrium sorption）。

在土壤吸附选项卡中“option”只有‘ $K_{om}$ , pH-independent’一项可选，其余两项在目前模型中并不适用。TOP-RICE模型通过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。只需要再填入土壤吸附系数。水相参考浓度的默认值是 $1\text{ mg L}^{-1}$ 。Freundlich 吸附指数的默认值为0.9。

对于非平衡吸附，除上述参数外，要求输入两个额外的参数，即解吸附速率系数（desorption rate coefficient）默认为0d，也就是说默认不考虑非吸附过程。非平衡吸附与平衡吸附中Freundlich系数的相关系数默认为0。

**Edit Substance**

General | Sorption | Transformation | Crop processes

Soil | Water | Sediment

**Equilibrium sorption**

Option: \* Kom, pH-independent ⓘ

Measured at (°C): 20 ⓘ

Reference concentration in liquid phase (mg L<sup>-1</sup>): \* 1 ⓘ

Molar enthalpy of sorption (kJ mol<sup>-1</sup>): \* 0 ⓘ

Freundlich sorption exponent (-): \* 0.9 ⓘ

**Kom, pH-independent**

Kom (L kg<sup>-1</sup>): \* 4727.96 ⓘ

**Non-equilibrium sorption**

Desorption rate coefficient (d<sup>-1</sup>): \* 0 ⓘ

Factor relating Freundlich coefficient for non-equilibrium sorption and equilibrium sorption (-): 0 ⓘ

(\* indicates a required property for PEARL for TOP-Rice, TOXSWA for TOP-Rice)

图8. 土壤吸附选项卡

2) 水中吸附（图9）包含两部分：悬浮固体颗粒物对农药的平衡吸附、水生植物对农药的平衡吸附。其中参数包括：

- 土壤吸附系数（Kom，pH-independent）；
- Freundlich 吸附指数（Freundlich sorption exponent）；
- 参考浓度（Reference concentration）；
- 水生植物对农药的线性吸附系数（Coefficient for linear sorption on macrophytes）。

**Edit Substance**

General | Sorption | Transformation | Crop processes

Soil | Water | Sediment

**Equilibrium sorption in suspended solids**

Kom (L kg<sup>-1</sup>): \* 4727.96 ⓘ

Freundlich sorption exponent (-): \* 0.9 ⓘ

Reference concentration (mg L<sup>-1</sup>): \* 1 ⓘ

**Equilibrium sorption in macrophytes**

Coefficient for linear sorption on macrophytes (L kg<sup>-1</sup>): \* 0 ⓘ

(\* indicates a required property for PEARL for TOP-Rice, TOXSWA for TOP-Rice)

图9. 水中吸附选项卡

悬浮固体颗粒物对农药的平衡吸附系数同土壤中吸附系数。Freundlich 吸附指数的默认值为0.9。参考浓度为1mg/L。水生植物对农药的线性吸附系数的默认值为0L/kg，默认为不考虑水生植物吸附。

3) 沉积物吸附（暂时不在TOP-RICE模型应用范围内）

转化选项卡

1) 好氧条件下的土壤转化转化选项卡中的参数（图10）如下：

- 半衰期（Half-life）；

- 植物生长的最佳土壤湿度环境（Optimum moisture conditions）；
- 液体影响指数（Exponent for the effect of liquid）；
- 摩尔活化能（Molar activation energy）。

好氧条件下的土壤降解半衰期为模型运算必要参数。参数测定时的使用温度必须指明。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（例如比 $pF$  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。

**Edit Substance**

General | Sorption | Transformation | Crop processes

Soil - aerobic | Anaerobic | Water | Sediment

**Aerobic transformations**

Half-life (d): \* 76 ⓘ

Measured at (temp): 20 ⓘ

Option moisture conditions ( $pF=2$  or wetter): \* ☒ ⓘ

Exponent for the effect of liquid (-): \* 0.7 ⓘ

Molar activation energy (kJ mol<sup>-1</sup>): \* 65.4 ⓘ

Option for biphasic transformation: ☐ ⓘ

Days after initial application bi-phasic half-life begins (d): ⓘ

Moisture content as measured in transformation study (%): ⓘ

Option for moisture content in transformation study: ⓘ

Q10 Factor for effect of temperature on transformation: ⓘ

$pF$  at which DT50 is measured (1,2) (log[cm]): ⓘ

Effect of temperature (temp): ⓘ

(\* indicates a required property for PEARL for TOP-Rice, TOXSWA for TOP-Rice)

图10 土壤中好氧降解

## 2) 和厌氧条件下的土壤转化。

厌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。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。

**Edit Substance**

General | Sorption | Transformation | Crop processes

Soil - aerobic | Anaerobic | Water | Sediment

**Anaerobic transformations**

Half-life anaerobic (d): \* 1000 ⓘ

Measured at (temp): 20 ⓘ

Molar activation energy (kJ mol<sup>-1</sup>): \* 65.4 ⓘ

(\* indicates a required property for PEARL for TOP-Rice, TOXSWA for TOP-Rice)

图11 土壤中厌氧降解

水体中降解

在此选项卡中，用户必须指定能够影响化合物在水体中转化率的参数。水体中转化选项卡包含两部分：

- 第一部分是池塘水层中的降解
- 第二部分是稻田水水层中的降解

池塘水层中的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。稻田水水层中的降解半衰期使用默认值1000天。

**Edit Substance**

General | Sorption | Transformation | Crop processes

Soil - aerobic | Anaerobic | Water | Sediment

**Water layer of water body**

Half-life (d): \* 68 ⓘ

Measured at (°C): 20 ⓘ

Molar activation energy (kJ mol<sup>-1</sup>): \* 75 ⓘ

**Water layer of paddy field**

Half-life in paddy layer (d): \* 1000 ⓘ

(\* indicates a required property for PEARL for TOP-Rice, TOXSWA for TOP-Rice)

图12 水体中降解

池塘底部沉积物中降解

在这一选项卡中，用户需指定影响池塘底部沉积物中降解速率的参数。这一部分不在TOP-RICE模型应用范围内。

作物选项卡

TOP-RICE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14）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价的描述（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。

**Edit Substance**

General | Sorption | Transformation | Crop processes

**Canopy**

Wash-off factor (m<sup>-1</sup>): \* 100 ⓘ

Canopy process option: \* Lumped ⓘ

**Lumped**

Half-life at crop surface (d): \* 10 ⓘ

**Plant root**

Coefficient for uptake by plant (-): \* 0 ⓘ

(\* indicates a required property for PEARL for TOP-Rice, TOXSWA for TOP-Rice)

图13.作物过程

### 1.7.2 农药代谢物界面

在用户定义了所有单个化合物的理化性质之后（详见1.7.1），就可以建立降解途径了。农药降解途径界面可以从化合物界面进入，使用“打开农药代谢物界面（Open Metabolites Form）”按钮。用户需要选择母体降解形成的代谢物名称以及填写降解转化率（fraction transformed）。如果用户定义了一个母体农药（PEST）和两个代谢物（如MET1 和 MET2），那么完成上述操作降解途径界面必须打开三次，一次是在PEST化合物界面，一次是在MET1化合物界面，一次是在MET2化合物界面。

首先用户可以定义农药母体（PEST）的转化途径。打开PEST化合物界面，点击“打开农药代谢物界面（Open Metabolites Form）”按钮。在界面的顶端，用户可以看到3个选项卡：在土壤中降解、在水体中降解和在池塘底部沉积物中降解（在模型中没有应用）。在界面中央，用户可以看到PEST的代谢物。在编辑之前，模型默认PEST没有代谢物。如果用户不修改任何参数，TOP-RICE将不会模拟代谢物。用户可以通过导航区的+按钮来添加新代谢物。从化合物列表中选择代谢物。在添加完代谢物后，输入母体农药生成这种代谢物的转化率（fraction transformed）。如果用户想添加更多的代谢物，请重复上述三步。对于其他两个代谢物重复上一段的步骤。在这之前，首先点击“打开农药代谢物界面（Open Metabolites Form）”按钮。

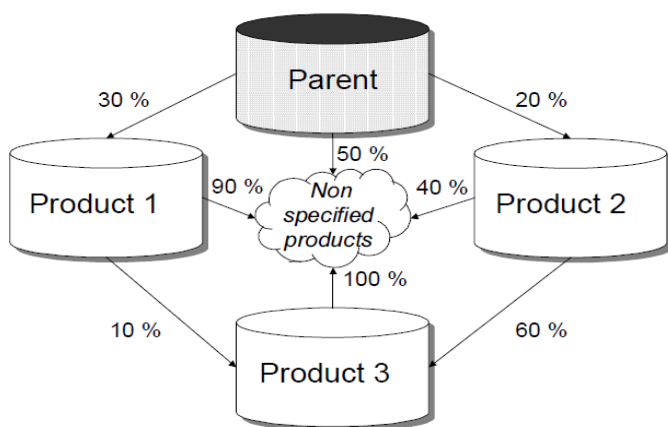


图14.一种农药的降解途径图例

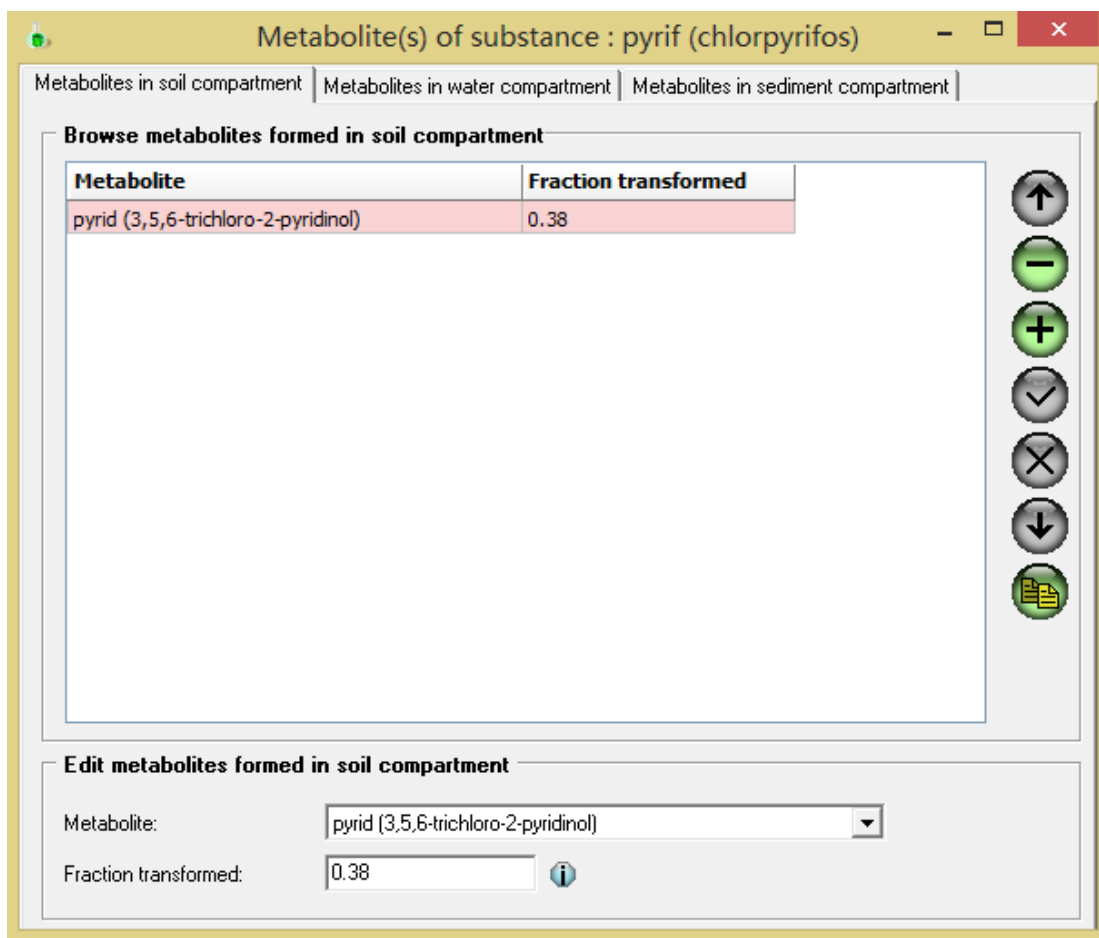


图15. 农药代谢物界面

## 1.8 编辑农药施药方案

农药施药方案界面可以从主界面进入。在导航区应用+按钮添加新的农药施药方案。用户也可以直接复制一个已经存在的应用方案。对于新的农药施药方案需要填写标题和描述。

应用右侧导航区的+按钮添加一个新的应用事件或者复制一个已经存在的事件。在右侧下半部，事件的信息会被详细定义。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或者从日历中选择即可。用户必须指定年份，但是年份数据不会用的模型计算中。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。喷雾飘移系数（%）需要用户指定，默认值为0.3%。



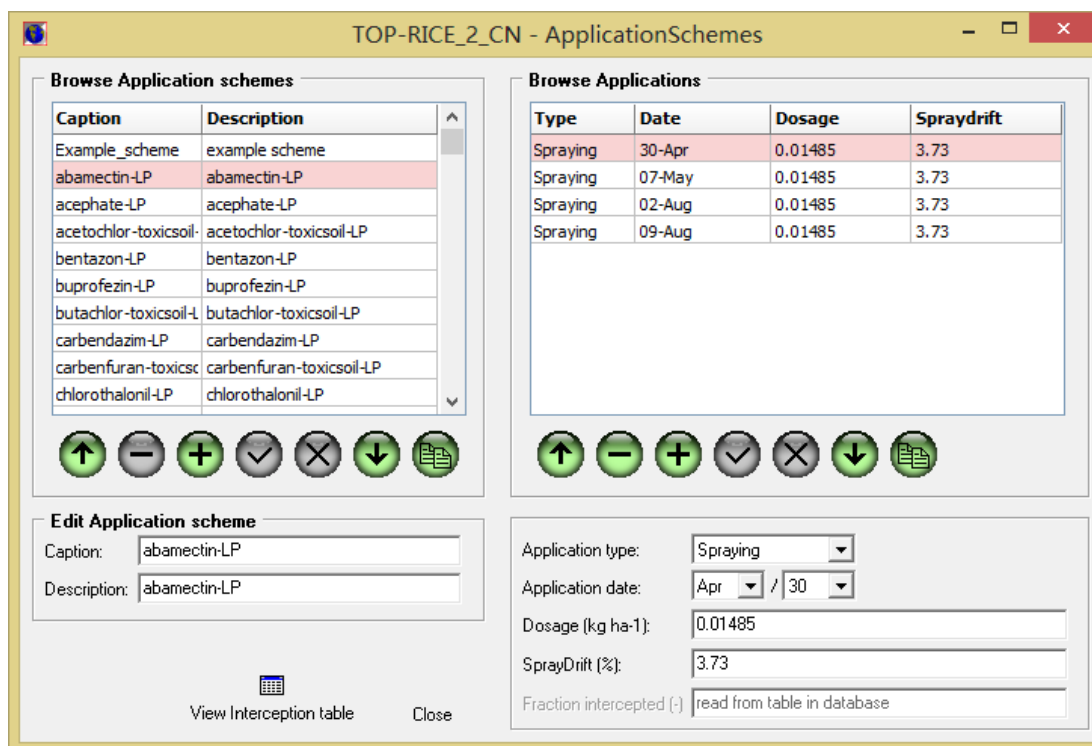


图16 农药施药方案界面

## 1.9 运行模型

当编辑完成模型输入参数后，用户就可以运行模型了。强大的TOP-RICE用户界面运行用户执行一个运行序列，以便可以连续运行评估条目。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”按钮来执行运算。当第一次执行条目时，TOP-RICE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TOP-RICE的输入文件。

## 1.10 模型输入参数和输出结果

### 1.10.1 TOP-RICE模型输入参数

TOP-RICE模型所有输入参数以及相关默认值已经汇总于表1，其中字体加粗的部分为模型必需输入参数，没有默认值。

表 1 TOP-RICE 模型输入参数

参数项	单位	默认值	备注
摩尔分子量 Molar mass	(g mol <sup>-1</sup> )	-	范围：10-1.0×10 <sup>4</sup> 。
饱和蒸气压 Saturated vapor pressure	(Pa, °C)	-	范围：0-10。如果测量温度未指定，默认为 20 °C。如果存在多个数值，取算术平均数；如果没有数




			据, 取 0 Pa, 20 °C
水中溶解度 Solubility in water	(mg L <sup>-1</sup> , °C)	-	范围: 0.001-1.0×10 <sup>6</sup> 。如果测量温度未指定, 默认为 20 °C。如果存在多个数值, 取算术平均数
摩尔蒸发焓 Molar enthalpy of vaporization	(kJ mol <sup>-1</sup> )	95	范围: -200-200
摩尔溶解焓 Molar enthalpy of dissolution	(kJ mol <sup>-1</sup> )	27	范围: -200-200
水中参照扩散系数 Reference diffusion coefficient in water	(m <sup>2</sup> d <sup>-1</sup> , °C)	4.3 x 10 <sup>-5</sup> , 20°C	范围: 0-200
空气中参照扩散系数 Reference diffusion coefficient in air	(m <sup>2</sup> d <sup>-1</sup> , °C)	0.43, 20°C	范围: 0.1-3
平衡吸附 Equilibrium sorption			
吸附平衡类型		Kom, pH-independent	现阶段唯一可用选项
土壤有机质吸附常数 Kom	(L kg <sup>-1</sup> , °C)	-	范围: 0-1.0×10 <sup>7</sup> 。如果测量温度未指定, 默认为 20 °C。如果存在多个数值, 取几何平均数。Kom= Koc/1.724
水相中的参考浓度 Reference concentration in liquid phase	(mg L <sup>-1</sup> )	1	范围: 0.001-100
摩尔吸附焓 Molar enthalpy of sorption	(kJ mol <sup>-1</sup> )	0	范围: -100-100
Freundlich 吸附指数 Freundlich sorption exponent in soil	(--)	0.9	范围: 0.1-1.5
非平衡吸附 Non-equilibrium sorption			
解吸附速率系数 Desorption rate coefficient	(day <sup>-1</sup> )	0	范围: 0-0.5
Factor relating Freundlich coefficient for non-equilibrium sorption and equilibrium sorption	(--)	0	范围: 0-100
悬浮颗粒物中的平衡吸附 Equilibrium sorption in suspended solid			
Kom, 水中悬浮颗粒物	(L kg <sup>-1</sup> , °C)	土壤中 Kom	范围: 0-1.0×10 <sup>7</sup> 。如果测量温度未指定, 默认为 20 °C。如果存在多个数值, 取几何平均数。Kom= Koc /1.724
参考浓度 Reference concentration	(mg L <sup>-1</sup> )	1	范围: 0.001-100

Freundlich 吸附指数 Freundlich sorption exponent	(--)	0.9	范围：0.1-2
水生植物中的平衡吸附 Equilibrium sorption in macrophytes			
水生植物对农药的线性吸附系数 Coefficient for linear sorption on macrophytes	(L kg <sup>-1</sup> )	0	范围：0-1.0×10 <sup>7</sup>
降解选项卡 Transformation			
好氧降解 Aerobic transformation			
半衰期 Half life	(days, °C)	-	范围：0.1-1.0×10 <sup>6</sup> 。如果存在多个数值，取几何平均数。如果测量温度未指定，默认为 20 °C。
最佳湿度条件 Optimum moisture conditions		勾选	
液体影响指数 Exponent for the effect of liquid	(--)	0.7	范围：0-5
摩尔活化能 Molar activation energy	(kJ mol <sup>-1</sup> )	65.4	范围：0-200
厌氧降解 Anaerobic transformation			
半衰期 Half life	(days, °C)	-	范围：0.1-1.0×10 <sup>6</sup> ，如果没有数据，默认值为 1000days，20°C。如果存在多个数值，取几何平均值。如果测量温度未指定，默认为 20 °C。
摩尔活化能 Molar activation energy	(kJ mol <sup>-1</sup> )	65.4	范围：0-200
在池塘水中降解 Water layer of water body			
半衰期 Half life	(days, °C)	1000, 20°C	范围：1-1.0×10 <sup>6</sup> 。如果没有数据，默认值为 1000days，20°C。如果存在多个数值，取几何平均数。如果测量温度未指定，默认为 20 °C。水解半衰期在多种 pH 值条件下均有数据时选择三个 pH 条件下水解半衰期的最大值
摩尔活化能 Molar activation energy	(kJ mol <sup>-1</sup> )	75	范围：0-200
在稻田水中降解 Water layer of paddy field			
半衰期 Half life	(days, °C)	-	范围：1-1.0×10 <sup>6</sup> 。如果无数据，默认值为 1000days，20°C。如果存在多个数值，取几何平均数。如果测量温度未指定，默认为 20 °C。水解半衰期在多种 pH 值条件下均有数据时选择三个 pH 条件下水解半衰期的

			最大值
作物选项卡 Crop processes			
冲刷因子 Wash-off factor	(m-l)	100	范围: $1.0 \times 10^{-6}$ - 100
叶面选项 Canopy process option	Lumped (视为等同的)	10	
	Specified (需要分别指定在叶面渗透、降解和挥发的半衰期)	10 (降解半衰期)	取值范围: $1-1.0 \times 10^6$
	Calculated (需要分别指定在叶面渗透和降解的半衰期)	10 (降解半衰期)	取值范围: $1-1.0 \times 10^6$
农药从根系被水稻吸收的系数 Coefficient for uptake by plant	(--)	0	取值范围: 0-10
代谢物选项卡 Metabolites in soil compartment			
转化率 Fraction	(--)	0	
农药施药界面 Application Scheme			
施药方式		喷雾	
施药日期			根据农药标签确定施药时间
施药剂量	(kg a.i. ha <sup>-1</sup> )		根据农药标签确定施药剂量, 取推荐剂量的最大值
飘移率	(%)	3.73	当施药时, 若水稻株高=5cm 时, 则设定为 3.73; 当水稻株高=50cm 时, 设定为 1.16

### 1. 10. 2 TOP-RICE模型输出结果

TOP-RICE模型输出结果可以点击模型界面上的  Assessment report 按钮进行查看。软件会弹出对话框, 请选择以何种文件格式查看结果。

打开结果界面后, 请找到“Leaching summary for XXX”数据区, 用户可看到化合物XXX的关键环境参数和20年的年际模型模拟地下水中化合物浓度的结果。在此之后, 需要用户提取的信息为:

The average concentration of XXX closest to the 89th percentile is xxx ug/L (场景为连平);

The average concentration of XXX closest to the 77th percentile is xxx ug/L (场景为南昌)。

上述信息实际表示在第99百分位的模型模拟结果，因为场景中的土壤脆弱性已固化在模型中，报告中出现89百分位和77百分位表示的是在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。

同理，在“TOXSWA REPORT: Target percentiles water layer”中，用户可在如下数据行提取天然池塘中化合物在90百分位的暴露浓度结果：

The 89 percentile peak concentration of XXX in the pond is xxx ug/L（场景为连平）；

The 77 percentile peak concentration of XXX in the pond is xxx ug/L（场景为南昌）。

## 1.11 模型安装与技术支持

首先安装数据库软件SPIN，再安装TOP-RICE模型用户界面。执行exe文件即可进行模型安装。系统会引导用户完成整个安装过程。

目前，模型版本如下：

- TOP-RICE shell version 2 (January 2012)
- TOP-RICE database version 2 (January 2012)

TOP-RICE\_2\_CN模型在安装之前，需确保已安装SPIN (Substance Plug In)程序，该程序主要用于管理模型中化合物数据库。此后，在setup\_toprice\_2\_cn.exe处单击鼠标右键选择以“管理员身份运行”，请注意不要双击鼠标左键（图17）。默认的安装路径为：

“C:\Program Files\PesticideModels\TOP-RICE”，用户可在安装时进行修改。TOP-RICE\_2\_CN模型数据库默认安装在用户的个人文件夹内，依个人计算机设定可能有所不同，在安装过程中也可以修改。

系统软硬件要求：

操作系统：适用于Windows XP、Windows Vista、Windows 7、Windows 8。

权限要求：管理员权限。

要求软件环境：必须提前安装SPIN version 1.0.3.2 或更高版本。

所需硬盘空间：安装软件需要7 MB，安装数据库需要额外 6.5 MB。

如有任何问题，请联系中华人民共和国农业部农药检定所。

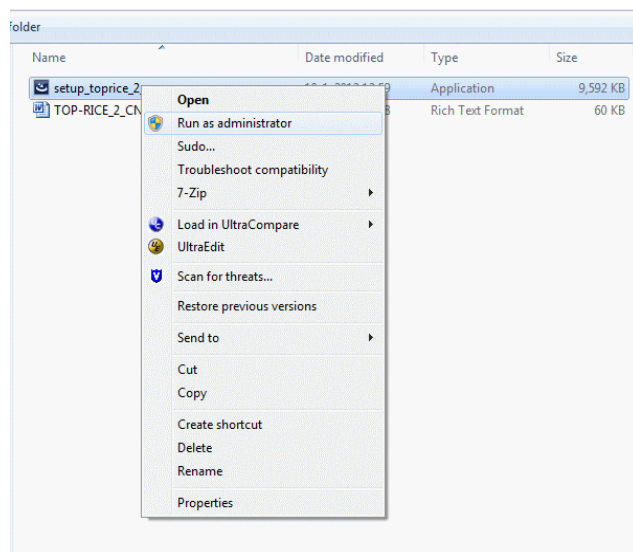


图17 TOP-RICE\_2\_CN软件安装说明



## 参考文献和背景资料

- Adriaanse, P.I., 1995. *The TOXSWA model concept*. In: S.J.H. Crum and J.W. Deneer (Eds.), Development of the model TOXSWA for the prediction of the behavior of pesticides in surface waters. Proceedings of a workshop on the model TOXSWA, November 8, 1994, DLO Winand Staring Centre, Report 105, Wageningen, p. 13-32.
- Adriaanse, P.I., 1996. *Fate of pesticides in field ditches: the TOXSWA simulation model*. DLO Winand Staring Centre, Report 90, Wageningen.
- Adriaanse, P.I., 1997. Exposure assessment of pesticides in field ditches: the TOXSWA model (Extended summary SCI Pesticide Group Meeting Ecotoxicology of Organic Compounds in the Aquatic Environment). *Pestic. Sci.* 49:210-212.
- 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
- 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.