

T/CSES 1.1—202X

ICS 13.020.10

CCS Z 04

团 体 标 准

T/CSESXXXX-2023

页岩气（页岩油）开发地块特征污染物土壤环境生态安全阈值确定技术指南

Technical guidelines for deriving soil environmental
ecological security threshold of characteristic pollutants in
shale gas (shale oil) development plots

(征求意见稿)

XXXX-XX-XX 发布

XXXX-XX-XX 实施

中国环境科学学会 发布

目 次

前 言	II
1 范围	1
2 规范性引用文件	1
3 术语和定义	1
4 生态安全阈值确定程序	3
5 土壤环境暴露场景分析	4
6 生态受体及生态过程的筛选	5
7 特征污染物生态毒性数据获取及筛选	5
8 土壤环境生态安全阈值的推导	6
9 土壤生态安全阈值推导的不确定性分析	8
10 土壤环境生态安全阈值的审核	8
附 录 A（资料性） 页岩气开发地块特征污染物土壤环境暴露场景分析示例	9
附 录 B（资料性） 常用的毒性数据库	10
附 录 C（资料性） 中国农用地土壤 4 种典型情景的土壤性质参数	11
附 录 D（资料性） 物种敏感性分布曲线拟合函数公式	13
附 录 E（资料性） 页岩气开发地块特征污染物土壤环境生态安全阈值确定报告编制大纲	16
参 考 文 献	17

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。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别专利的责任。

本文件由生态环境部华南环境科学研究所和中国热带农业科学院环境与植物保护研究所提出。

本文件由中国环境科学学会归口。

本文件起草单位：生态环境部华南环境科学研究所，中国热带农业科学院环境与植物保护研究所，中国矿业大学（北京），重庆大学，重庆三峡学院。

本文件主要起草人： 。

1 范围

本文件规定了页岩气（页岩油）开发地块土壤环境生态安全阈值确定的程序、方法与技术要求。

本文件适用于我国页岩气（页岩油）开发地块及其周边区域特征污染物的土壤环境生态安全阈值的制定。

本文件不适用于致病性生物、放射性物质以及其他物理性污染（如噪声、热污染）的土壤环境生态安全阈值的确定。

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文件必不可少的条款。其中，注日期的引用文件，仅该日期对应的版本适用于本文件；不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

GB/T 3359 数据的统计处理和解释 统计容忍区间的确定

GB/T 41611 页岩气术语和定义

GB/T 4883 数据的统计处理和解释 正态样本离群值的判断和处理

GB/T 8056 数据的统计处理和解释 指数分布样本离群值的判断和处理

HJ 1185 区域性土壤环境背景含量统计技术导则（试行）

HJ 1231 土壤环境 词汇

HJ/T 166 土壤环境监测技术规范

HJ 25.1 建设用地土壤污染状况调查技术导则

HJ 682 建设用地土壤污染风险管控和修复术语

NY/T 395 农田土壤环境质量监测技术规范

3 术语和定义

下列术语和定义适用于本文件。

3.1

页岩气 shale gas

以游离态、吸附态为主，少量溶解态，赋存于富有机质页岩层段中的天然气。

注：一般具有自生自储、大面积连续分布、储层低孔低渗、单井无自然产能或低产，需通过增产改造才能获得工业气流等特点。

[来源：GB/T 41611—2022, 3.1]

3.2

井场 well site

页岩气单井、平台井生产设施的场所。

[来源：GB/T 41611—2022, 8.1]

3.3

页岩气开发地块 shale gas development plots

指页岩气开发矿权区域。

注：我国页岩气开发涉及污染生态影响的主要有两类：其一为页岩气生产平台，一般每个平台 3~6 口井，甚至更多；其二为页岩气开发矿权区域，上述的生产平台均分布在该区域内，平台间距在 5 公里左右。本文件规定的页岩气开发地块属于第二种情况。

3.4

地块生态风险评估 ecological risk assessment for land for construction

对地块各环境介质中的污染物危害动物、植物、微生物和其他生态系统过程与功能的概率或水平与程度进行评估的过程。

[来源：HJ 682-2019, 2.4.4]

3.5

土壤环境背景含量 environmental background concentration of soil, C_b

一定时间条件下，仅受地球化学过程和非点源输入影响的土壤中元素或化合物的含量。

[来源：HJ 1185—2021, 3.1]

3.6

土壤环境生态安全阈值 soil ecological safety threshold, EST

保证页岩气（页岩油）开发场地及周边生态受体安全的土壤中污染物的最大允许含量。

3.7

敏感受体 sensitive receptor

受地块污染物影响的潜在生物类群中，对污染物反应最敏感的受体。

[来源：HJ 1231—2022, 5.7]

3.8

x%效应浓度 effect concentration for x% effect, EC_x

与对照相比，在给定暴露期内对给定终点产生 x%影响的某一受试物质的浓度。

[来源：HJ 1231—2022, 7.1.8]

3.9

x%危害浓度 hazardous concentration (HC_x)

受影响物种的累积概率达到 x%时的污染物质浓度，或（100-x）%的物种能够得到有效保护的污染物质浓度。

3.10

无观察效应浓度 no observed effect concentration, NOEC

在规定的暴露条件下，通过实验和观察，一种外源污染物质不引起生物任何有害作用的最高浓度。

3.11

风险商 risk quotient, RQ

通常用于对某个单一化合物进行毒性效应评估，其计算方式是通过实际检测或者利用模型预测出的环境中该化合物的浓度与表明此物质胁迫程度的毒理数值相比，得到风险商值（RQ）。

[来源：T/CSES 23—2021, 3.20,有修改]

3.12

物种敏感度分布 species sensitivity distribution, SSD

描述不同物种由于生活史、生理构造、行为特征和地理分布等的不同，对某一污染物的敏感性差异遵循的概率分布规律。

[来源：HJ 831—2022, 3.7]

3.13

不确定性分析 uncertainty analysis

对风险评估过程的不确定性因素进行综合分析评价。

[来源：HJ 1231—2022, 5.21, 有修改]

4 生态安全阈值确定程序

页岩气（页岩油）开发地块特征污染物土壤环境生态安全阈值的确定主要包括以下步骤（图 1）：

- （1） 分析页岩气（页岩油）开发地块特征污染物的土壤环境暴露场景；
- （2） 确定需要保护的生态受体和生态过程及其暴露途径；
- （3） 有效毒性数据的获取及筛选以及土壤污染物背景含量获取；
- （4） 阈值推导方法的比较选择及确定；
- （5） 阈值的推导；
- （6） 阈值的确定及其不确定度分析；
- （7） 阈值的审核。

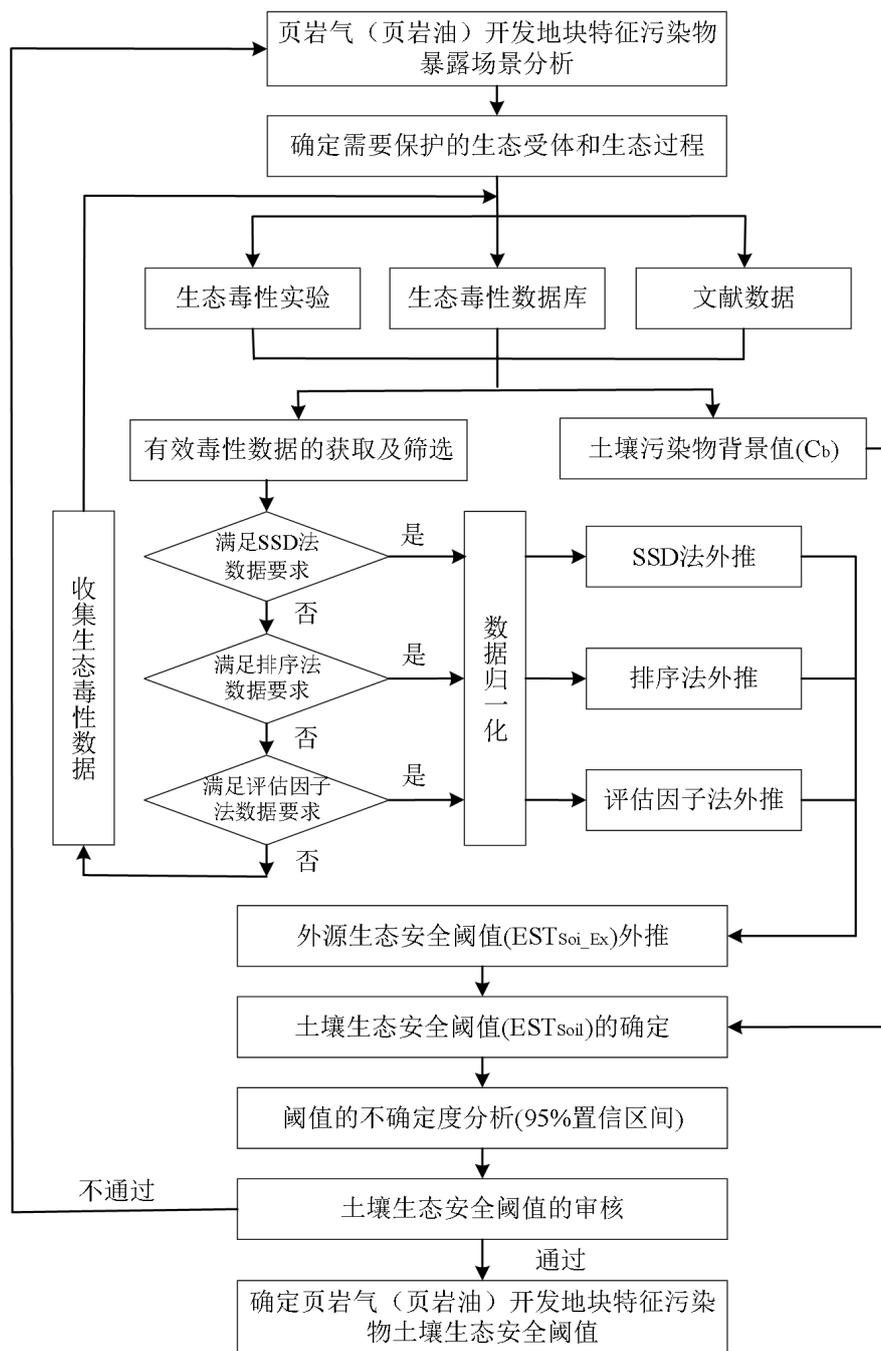


图1 页岩气（页岩油）开发地块特征污染物土壤环境生态安全阈值确定程序

5 土壤环境暴露场景分析

页岩气（页岩油）开发地块特征污染物生态安全阈值的推导首先应开展土壤环境暴露场景构建。土壤环境暴露场景构建主要分析识别以下几个方面（参考附录A）：

- (1) 与土壤污染相关的环境污染介质及其在页岩气（页岩油）开发过程中的产生环节；
- (2) 土壤环境高关注污染物的识别及特征污染物的筛选；
- (3) 土壤环境关键受体及其暴露途径的分析识别；
- (4) 土壤环境中特征污染物背景值的分析和确定。

6 生态受体及生态过程的筛选

以保护页岩气（页岩油）开发地块土壤环境及周边自然保护地和农田生态系统为主，其关键受体包括陆生植物（生产者）、无脊椎动物（消费者）和土壤微生物（分解者）及其主导的生态功能。制定土壤生态安全阈值需包含但不限于如下类型的重要土壤生态受体和生态功能：

（1）陆生植物，如农作物和需要保护的野生植物等，需保证每种陆生植物物种的毒性数据量大于等于 3 个；优先选择植物生长（生物量、出苗率、芽长、根伸长和产量）等指标。

（2）土壤无脊椎动物，如蚯蚓、跳虫、螨虫、线虫等，需保证每种土壤无脊椎动物的毒性数据量大于等于 2 个；优先选择繁殖（如产卵数量、繁殖率和成熟率等）和生长（体长、生物量和生长率等）等指标。

（3）土壤微生物和微生物主导的土壤生态过程，如微生物生物量、土壤呼吸作用、土壤硝化作用、矿化作用、土壤酶活性等，需保证每种土壤微生物和微生物主导的土壤生态过程的毒性数据量大于等于 3 个。

7 特征污染物生态毒性数据获取及筛选

7.1 毒性数据来源

物种毒性参数的数据可通过土壤生态毒性实验以及各种毒性数据库和公开发表的文献等各种来源获取。常用的毒性数据库参考附录 B。

当毒性数据不能满足特征污染物生态安全阈值推导的最低数据要求时（具体数据要求见本文件第 8 章），应开展相应的生物毒理学实验以补充相关毒性数据；补充试验应充分考虑本土关键物种为受试对象。

7.2 毒性数据的筛选原则

从毒性数据库或者文献资料中获取的毒性数据的筛选应遵循可靠性、丰富性、实用性的原则：

（1）生态毒性试验方法应遵照当前公认的生态毒性试验标准方法（如 GB/T 21809、GB/T 31270 等或 ISO 11269、ISO 16198、ISO 18763 等标准）；未采用标准试验方法获得的毒性数据，应根据实际情况进行评估；

（2）应能根据文献资料确定土壤污染物的暴露时间和毒性终点（如生长、繁殖），并可根据剂量-效应关系估算关注的毒性效应数据 EC_x ；

（3）文献应记录毒性试验开展条件，如 pH 值、有机质含量（OC）和阳离子交换量（CEC）等；

（4）试验观察到的污染物的毒性效应归因于关注污染物，避免存在污染物混合体系；

（5）陆生植物、无脊椎动物和土壤生态过程相关生态毒性数据应分别筛选归类，单独评估。

7.3 毒性数据的归一化处理

7.3.1 通用要求

在采用 SSD 法等推导土壤环境生态安全阈值前，需将同一物种或同一品种在不同土壤条件下的生态毒性效应参数归一化到统一的土壤条件下。我国典型土壤情景的理化性质参数参考附录 C。

毒性效应参数（ EC_x ）优先选择 EC_{10} 。

7.3.2 自然保护地土壤特征污染物数据归一化

自然保护地土壤特征污染物数据归一化采用种间外推归一化法，即以生物分类学相近的物种建

立的回归模型为基础，数据按下列公式进行归一化：

$$EC_{x_std} = EC_{x_p} \cdot 10^{\left[a \cdot (pH_{std} - pH_p) + b \cdot \left(\frac{OC_{std}}{OC_p} \right) + c \cdot \left(\frac{CEC_{std}}{CEC_p} \right) \right]} \quad (\text{式 1})$$

式中： EC_{x_std} ——标准土壤条件下的 $x\%$ 效应浓度；
 pH_{std} ——标准土壤条件下的土壤 pH 值；
 OC_{std} ——标准土壤条件下的土壤有机质含量；
 CEC_{std} ——标准土壤条件下的土壤阳离子交换量；
 EC_{x_p} ——实验土壤条件下的 $x\%$ 效应浓度；
 pH_p ——实验土壤条件下的土壤 pH；
 OC_p ——实验土壤条件下的土壤有机质含量；
 CEC_p ——实验土壤条件下的土壤阳离子交换量。

注：若无法从数据库和文献资料中获得足够数量的 EC_{10} 毒性数据，则可利用具有明显剂量效应关系的原始数据通过合适方法推导出 EC_{10} 。

7.3.3 农用地土壤特征污染物数据归一化

对于农用地土壤特征污染物的数据归一化处理，除了采用公式 1 的归一方法之外，当有多个与土壤性质相对应的物种毒性数值时，且有足够的数据建立自身的回归模型，也可利用多元线性归一化法将毒性参数值归一化到统一的土壤条件下，如公式（2）所示：

$$\log(EC_x) = a \cdot \log(pH) + b \cdot \log(OC) + c \cdot \log(CEC) + d \quad (\text{式 2})$$

式中， EC_x —— $x\%$ 效应浓度；
 a 、 b 、 c 、 d ——回归模型参数；
 pH ——供试土壤 pH 值；
 OC ——供试土壤有机质含量；
 CEC ——供试土壤阳离子交换量。

7.3.4 土壤特征污染物数据归一化取值原则

- (1) 对采用同一物种和同一供试土壤获得的同一测试终点的毒性数据，取几何平均值；
- (2) 对采用同一物种和同一供试土壤获得的不同测试终点的毒性数据，取最小值；
- (3) 对采用同一物种和不同供试土壤获得的同一测试终点的毒性数据，取最小值。
- (4) 微生物生态过程描述了整个微生物群落执行一个生态功能的能力，可能由一个以上的物种执行，因此针对其生态过程毒性数据：对采用同一供试土壤获得的同一生态过程的毒性数据，取几何平均值；对采用不同供试土壤获得的毒性数据，不作处理。
- (5) 上述归一化模型（公式（1）和公式（2））通过土壤性质对各污染物的生态毒性数据进行预测，并与实测值进行比较，验证回归模型的合理性；合理性判断可根据决定系数（ R^2 ）和 p 值大小进行判断（见附录 E）。其中，公式（1）和公式（2）中 OC 和 CEC 是选择其一或者全部选择应根据回归模型的合理性结果进行判别。

8 土壤环境生态安全阈值的推导

8.1 生态安全阈值推导方法

本标准规定的页岩气（页岩油）开发地块特征污染物土壤环境生态安全阈值的阈值推导采用外源生态安全阈值结合土壤环境背景含量方法，如下式：

$$EST_{Soil} = EST_{Soil_Ex} + C_b \quad (\text{式 3})$$

式中， EST_{Soil} ——页岩气（页岩油）开发地块特征污染物土壤环境生态安全阈值；

EST_{Soil_Ex} ——推导的外源生态安全阈值；

C_b ——土壤环境背景含量。

开展土壤环境生态安全阈值推导时，根据生态受体营养级、生态毒性数据类型及数据量的多少等情况（具体要求见本文件第 8.2 节至 8.4 节），选择不同的数据外推方法估算 EST_{Soil_Ex} 值，根据优先顺序依次选择 SSD 法、排序分布法、评估因子法。其中，采用排序分布法和评估因子法是为了在必要时制定特征污染物的土壤生态安全阈值的临时值，待毒性数据量足够时，仍需按照 SSD 外推法对阈值进行修订。

C_b 值可采用现有的文献资料数据，或根据实际情况需要开展土壤环境背景含量调查分析（按 HJ 1185 要求执行）。当土壤环境背景中不存在某污染物时该参数为 0。

土壤环境生态安全阈值的制定主要是为了保护页岩气（页岩油）开发地块及周边自然保护地和农用地等 95% 的生物物种和生态过程，因此采用 SSD 法制定时以 HC_5 作为危害浓度，或采用排序分布法制定时以 5% 分布预测值作为危害浓度。

8.2 基于 SSD 法的外源生态安全阈值推导

采用 SSD 法推导土壤环境生态安全阈值的主要步骤包括：收集和筛选物种的毒性数据；将生物毒性数据以大小排列的分位数作图；选定某一特定分布对这些数据进行参数拟合；通过拟合优度评价确定 SSD 曲线。基于 SSD 法的外源生态安全阈值推导的毒性数据需要满足以下要求：

(1) 物种应该至少涵盖 2 个营养级及以上，如生产者、消费者、分解者。

(2) 有效毒性数据量满足 8 个以上（以能达到 10-15 个及以上为优）。

在构建 SSD 曲线推导 EST_{Soil_Ex} 时，可选用逻辑斯蒂分布、对数逻辑斯蒂分布、正态分布、对数正态分布、BurrIII、Weibull、Gamma 等分布函数（SSD 法拟合函数公式参考附录 D）。拟合分布模型的不同往往造成物种毒性阈值结果的不同，可根据拟合结果的均方根误差（root mean square error, RMSE）确定最佳的拟合函数（见附录 F）。

8.3 基于排序分布法的外源生态安全阈值推导

当毒性数据质量和类型不能满足采用 SSD 法推导、但满足排序分布法的推导要求时，可采用排序分布法进行阈值的推导，主要步骤包括：将从数据库或参考文献中筛选得到的毒性值 EC_x （有不同响应水平时，优先选择或转化为 EC_{10} ）分别按照从小到大的顺序进行排序，得到毒性数据序列，按公式（4）计算毒性数据在序列中的百分位数。

$$j = \frac{i}{n+1} \times 100 \quad (\text{式 4})$$

式中： j ——毒性数据序列中某一数据的百分位数；

i ——毒性数据序列中某一数据的顺序数；

n ——毒性数据总数。

将某一数据的百分位数（ j ）分别与生态受体或生态过程的 EC_x （优先选择 EC_{10} ）作图，选用上述 SSD 法模型分布函数进行拟合。选择 5% 位置的值得到 EST_{Soil_Ex} 值。

8.4 基于评估因子法的外源生态安全阈值推导

若无法获得足够有关土壤环境中生产者、消费者或分解者的生态毒理学数据，可选择毒性数据的最低值，采用评估因子法进行外推，评估因子值（ AF ）选择参考表 1。

$$EST_{soil_Ex} = \frac{EC_x}{AF} \quad (\text{式 5})$$

表1 评估因子 AF 取值

数据类型	评估因子
生物（如植物、蚯蚓或微生物）短期毒性试验的 $L(E)C_{50}$	1000
一种生物（如植物）长期毒性试验的 NOEC 值	100
来自 3 个营养级的生物长期毒性试验的 NOEC 值	50
来自 3 个营养级的 3 种以上生物长期毒性试验的 NOEC 值	10
已知物种敏感性分布曲线（SSD 法）	1~5，根据具体情况调整
野外试验数据或生态模型试验数据	根据具体情况决定取舍

9 土壤生态安全阈值推导的不确定性分析

土壤环境生态安全阈值确定前，应明确推导的外源生态安全阈值的不确定性范围（95%置信区间）和土壤环境背景含量（ C_b ）的不确定度范围。

推导的外源生态安全阈值的不确定性分析：①SSD 法推导阈值（ HC_5 ）的不确定性分析：拟合优度检验在 0.05 显著水平上的、可拟合度低于 95%统计值的输入数据值可接受，以此给出 95%置信区间的数值；②排序分布法推导阈值的不确定性分析参照 SSD 法；③评估因子法推导阈值的不确定性分析：应采用概率分析方法给出其 95%置信区间的数值。

土壤环境背景含量（ C_b ）的不确定性分析：①直接引用全国土壤环境调查背景值时（如部分重金属元素），不再分析其不确定度范围；②通过实际测试分析得到的页岩气（页岩油）开发区域土壤环境背景值，需开展数据统计分析（获得算术平均值（ \bar{x} ）、算术标准差（ S ）、几何平均值（ M ）、几何标准差（ D ），见附录 E）并检验数据分布类型，给出 95%置信范围（正态分布采用 $\bar{x} \pm 2S$ ，对数正态分布采用 $M/D^2 \sim MD^2$ ，其他分布采用 2.5%~97.5%分位数）。

10 土壤环境生态安全阈值的审核

10.1 生态安全阈值的自审核项目

土壤环境生态安全阈值的最终确定需要仔细审核阈值推导所用数据以及推导步骤，以确保阈值合理可靠。自审项目如下：

- (1) 使用的数据是否符合数据质量要求。
- (2) 根据专业知识和经验识别和判断是否存在可疑数据。
- (3) 根据 GB/T 3359、GB/T 4883 和 GB/T 8056 等标准的规定，分析并判别是否存在明显异常数据。
- (4) 是否遗漏其它重要数据。

10.2 生态安全阈值的专家审核项目

- (1) 根据专业知识和经验识别和判断页岩气（页岩油）开发地块特征污染物暴露场景及暴露途径分析是否合理。
- (2) 生态安全阈值推导数据是否可靠。
- (3) 生态安全阈值推导过程是否符合技术标准。
- (4) 生态安全阈值的确定是否合理。
- (5) 生态安全阈值的不确定性分析是否合理。

附录 A

(资料性)

页岩气(页岩油)开发地块特征污染物土壤环境暴露场景分析示例

页岩气(页岩油)开发各工程阶段(井场建设、钻井、压裂试气、采气、集输等)产生的污染介质及其所含污染物类型非常复杂,因此应从污染介质特征和化学物质生态毒性效应等方面筛选优先关注的特征污染物,并进一步分析其土壤环境暴露场景。

(1)与土壤环境污染密切相关的污染介质主要为废水和固体废弃物。废水主要包括钻井废水、洗井废水、压裂返排液以及废水处理站的尾水等;固体废弃物主要包括钻井岩屑、水基岩屑、油基岩屑、清管废渣和污水处理站污泥等。

(2)钻井工程中发生的钻井液泄漏(一开至三开钻井)、洗井废水泄漏(洗井),测试工程中发生的压裂返排液泄漏(射孔压裂),以及井场平台废水池或废水处理站发生的废水泄漏(包括管道跑冒滴漏、池底底部出现裂缝)等情景时,则会对地块及其周边土壤造成污染。水基岩屑和油基岩屑等固体废弃物产生量大,处理成本高,堆存、转运和处理处置过程对土壤及地下水都具有潜在威胁。作业事故引发的溢流井喷等事故工况则会给土壤环境带来很大的生态风险。

(3)页岩气(页岩油)开发使用的钻井液、压裂返排液等添加种类繁多的化学药剂(石油烃类、重金属、无机盐、杀菌剂、高分子有机化合物),且地层地球化学物质(无机盐、重金属等)也会被钻井液或压裂返排液带出地表。目前,受关注的污染物种类主要有以下几种:季铵盐类化合物、非离子表面活性剂、芳烃化合物、重金属、高含量无机盐。结合污染物生态毒理效应研究结果,优先关注的特征污染物包括多环芳烃、重金属(Ba, As, Pb, Tl, Cd)、壬基酚、邻苯二甲酸酯等。

(4)土壤环境污染物的关键受体根据暴露途径分成土壤直接接触、土壤和食物摄入、土壤-地下水迁移3类。土壤直接接触途径是土壤环境生态安全阈值确定的主要暴露途径,并以陆生植物(生产者)、无脊椎动物(消费者)和土壤微生物(分解者)及其主导的生态功能作为该途径的关键受体。

(5)由于各个井场产生的污染介质中化合物成分复杂且差异很大,因此,开展特征污染物生态安全阈值推导时仅考虑其本身的生态毒性效应,不考虑与其他化合物的复合污染毒性效应。

(6)部分特征污染物在页岩气(页岩油)开发区域土壤环境中具有一定的背景值,因此推导土壤环境生态安全阈值时(尤其是采用本土关键物种时),需要考虑叠加土壤环境背景值。

附录 B
(资料性)
常用的毒性数据库

常用的毒性数据库如下所示：

(1) 欧洲化学品管理局 (ECHA) 的国际统一化学品信息数据库 (IUCLID)：Home-ECHA (europa.eu)，<https://iuclid6.echa.europa.eu>；

(2) 荷兰国立公共卫生与环境研究所 (RIVM) 的“生态毒理风险评价数据库”：
<http://www.e-toxbase.com>；

(3) 美国国立医学图书馆 (NLM) 建立的 TOXLINE 毒理学数据库：<https://toxnet.nlm.nih.gov/newtoxnet/toxline.htm>；

(4) 美国环保署建立的 ECOTOX 毒性数据库: ECOTOX|Search(epa.gov)，<https://cfpub.epa.gov/ecotox>；

(5) Elsevier 公司的“ECOTOX-CD”，<https://www.elsevier-ecotox.com>；

(6) 中国科学院南京土壤研究所建立的场地土壤污染物环境与毒性基础数据库等。

附 录 C
(资料性)
中国土壤典型情景的土壤性质参数

我国各省份和地区各种土壤类型（不同土纲或土种等）的土壤性质参数可查阅“中国土壤数据库”，（<http://vdb3.soil.csdb.cn/extend/jsp/introduction>）。表 C1—C4 为基于全国第二次土壤普查的不同类型数据统计。中国农用地土壤四种典型情景土壤性质参数的均值见表 C5^[6]。

表 C1 中国不同典型类型土壤有机质含量状况

土纲名称	样本数（个）	第二次普查平均值（g/kg）
水成土	5	108.7
淋溶土	18	50.7
高山土	8	63.89
铁铝土	8	31.83
钙层土	7	25.82
半淋溶土	12	29.19
半水成土	26	22.52
人为土	16	27.59
初育土	26	21.78
干旱土	5	11.51
盐碱土	2	13.63
漠土	6	9.08

表 C2 中国不同省份（直辖市）土壤有机质含量的统计特征

省份（直辖市）	样本数（个）	第二次普查平均值（g/kg）
黑龙江	8	37.48
贵州	4	31
西藏	4	26.92
云南	4	30.06
浙江	7	28.18
福建	7	24
广东	5	22.65
湖南	6	29.37
广西	4	26.28
江西	3	25.83
青海	3	24.72
上海	8	25.99
四川	7	18.62
吉林	7	24.4
内蒙古	2	19.94
湖北	19	24.4
海南	7	18.71
北京	5	14.82
新疆	9	16.29
山西	8	10.93

安徽	14	16.32
江苏	12	16.09
重庆	3	
辽宁	16	15.22
陕西	3	10.86
甘肃	6	14.73
宁夏	7	11.91
河南	17	12.54
河北	8	12.6
山东	11	9.8
天津		
全国	3	18.63

表 C3 中国地带性土壤（表层）理化性质状况

地理区	剖面数 (个)	OC		pH 值	
		算术均值 (g/kg)	标准差 (g/kg)	算术均值	标准差
全国	886	32.3	30.8	6.8	1.3
华东	86	26.3	21.3	5.3	0.8
华南	113	29.0	20.2	5.4	0.7
西南	97	53.6	43.3	6.4	1.3
东北	199	32.5	25.1	6.8	1.0
华北	175	26.0	26.7	7.7	0.9
西北	216	31.8	35.6	8.0	0.7

注¹⁾：基于全国第二次土壤普查的数据统计。

表 C4 重庆市不同类型土壤的理化性质状况¹⁾

土壤类型	样点数 (个)	pH 值 (中位数)	有机质 (g/kg)
红壤	3	5.9	33.1
黄壤	1006	6.1	24.3
黄棕壤	50	6.2	26.3
棕壤	14	6.5	36.2
石灰土	408	6.8	24.5
紫色土	2300	6.4	16.7
潮土	166	6.7	19.4
水稻土	2038	6.3	23.7
重庆市	5985	6.3	21.1

注¹⁾：基于全国第二次土壤普查的数据统计。

表 C5 中国农用地土壤四种典型情景的土壤性质参数

土壤类型	pH	CEC (cmol· kg ⁻¹)	OC (%)	Clay (%)
酸性土壤	5.0	10	1.0	55
中性土 (包括水稻土)	7.0	15	1.5	35
碱性土	7.5	25	3.0	35
石灰性土	8.5	10	1.0	20

附录 D

(资料性)

物种敏感性分布曲线拟合函数公式

常用的物种敏感性分布曲线拟合函数公式如下：

1) Burr III 型函数：

$$y = \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{b}{x}\right)^c\right]^k}$$

式中：y—累积概率，%；x—毒性值，mg/kg；b、c、k为函数的三个参数。

2) Log-normal 型函数：

$$y = \Phi\left(\frac{\ln x - \mu'}{\sigma}\right)$$

式中：y—累积概率，%；x—毒性值，mg/kg； μ' 和 σ 为函数参数。

3) Log-logistic 型函数：

$$y = \frac{1}{1 + \left(\frac{\beta}{x - \gamma}\right)^\alpha}$$

式中：y—累积概率，%；x—毒性值，mg/kg； α 、 β 、 γ 为函数参数。

4) Weibull 型函数：

$$y = 1 - e^{-\left(\frac{x}{\beta}\right)^\alpha}$$

式中：y—累积概率，%；x—毒性值，mg/kg； α 和 β 为函数参数。

5) Gamma 型函数：

$$y = \frac{\Gamma_{x/\beta}(\alpha)}{\Gamma(\alpha)}$$

式中：y—累积概率，%；x—毒性值，mg/kg； α 和 β 为函数参数。

附录 E

(资料性)

页岩气(页岩油)开发区域土壤环境背景值含量统计

页岩气(页岩油)开发区域土壤环境背景值的含量统计参数计算公式如下所示:

1) 算术平均值 (\bar{x})

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$$

2) 算术标准差 (S)

$$S = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}}$$

3) 几何平均值 (M)

$$M = \log^{-1} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x'_i \right)$$

4) 几何标准差 (D)

$$D = \log^{-1} \left(\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \left(x'_i - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x'_i \right)^2}{n-1}} \right)$$

式中: n—样本量, 个;

x_i —第 i 个样本值;

$x'_i = \log(x_i)$ ($i=1, 2, \dots, n$)。

附录 F
(资料性)
拟合优度评价模型

F.1 决定系数 (coefficient of determination, R^2)

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n \left(y_i - \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n} \right)^2}$$

式中： R^2 为决定系数，取值范围是[0,1]， R^2 越接近1，说明拟合优度越大，模型拟合越精准。 y_i 为实测值， \hat{y}_i 为预测值， n 为样本数量。

F.2 均方根 (root mean square errors, RMSE)

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

式中：RMSE为观测值与真值偏差的平方值与观测次数比值的平方根（均方根），RMSE又称回归系统的拟合标准差。RMSE在统计学意义上可反映出模型的精确度，RMSE越接近于0，说明模型拟合的精确度越高。 y_i 为实测值， \hat{y}_i 为预测值， n 为样本数量。

F.3 残差平方和 (sum of squares for error, SSE)

$$SSE = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$$

式中：SSE为实测值和预测值之差的平方和。SSE又称误差项平方和，反映每个样本各个预测值的离散状况，SSE越接近于0，说明模型拟合的随机误差效应越低。 y_i 为实测值， \hat{y}_i 为预测值， n 为样本数量。

F.4 K-S 检验 (kolmogorov - smirnov test)

基于累积分布函数，用于检验一个经验分布是否符合某种理论分布，它是一种拟合优度检验。通过K-S检验来验证分布与理论分布的差异时，若P值（即概率，反映两组差异有无统计学意义， $P > 0.05$ 即差异无显著性意义， $P < 0.05$ 即差异有显著性意义）大于0.05，证明实际分布曲线与理论分布曲线不具有显著性差异，通过K-S检验，可反映模型符合理论分布。

附录 G

(资料性)

页岩气(页岩油)开发地块特征污染物土壤环境生态安全阈值确定报告编制大纲

G.1 前言

G.1.1 页岩气(页岩油)开发地块特征污染物土壤环境生态安全阈值确定的重要性和必要性

G.1.2 土壤环境生态安全阈值的国内外研究进展

G.1.3 我国土壤环境生态安全阈值的研究现状

G.2 页岩气(页岩油)开发地块特征污染物的来源、性质、暴露场景及暴露途径

G.2.1 特征污染物的来源及其性质

G.2.2 特征污染物的暴露场景及暴露途径

G.2.3 特征污染物的毒性与毒性作用方式

G.2.3 典型页岩气(页岩油)开发区域土壤环境特征污染物背景值分析

G.3 特征污染物生态毒性数据集成与分析

G.3.1 毒性数据库集成分析

G.3.2 本土关键物种毒性试验数据分析

G.3.2 毒性终点集成分析

G.4 特征污染物土壤环境生态安全阈值的推导

G.4.1 阈值的推导

G.4.2 阈值的确定

G.4.2 阈值的不确定性分析

G.5 特征污染物土壤环境生态安全阈值的审核

G.5.1 土壤环境生态安全阈值与其他标准值的比较分析

G.5.2 阈值的审核

G.5.3 其他需要说明的问题

G.6 附件

参 考 文 献

- [1] 颜增光,谷庆宝,周娟,李发生.构建土壤生态筛选基准的技术关键及方法学概述[J].生态毒理学报,2008(05):417-427.
- [2] Bandeira F O, Lopes Alves P R, Hennig T B, et al. Chronic effects of clothianidin to non-target soil invertebrates: Ecological risk assessment using the species sensitivity distribution (SSD) approach [J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2021, 419: 126491.
- [3] 李勛之, 孙丽, 杜俊洋, 等. 农用地土壤重金属锌的生态安全阈值研究[J]. 环境科学学报, 2022, 42(7): 1-13.
- [4] Barnes, Mary; Correll, Raymond; Stevens, Daryl (2019). A simple spreadsheet for estimating low-effect concentrations and associated confidence intervals with logistic dose response curves. figshare. Dataset. <https://doi.org/10.6084/m9.figshare.7653470.v1>.
- [5] 万亚男. 我国土壤中锌的生态阈值研究[D]. 北京:中国农业科学院, 2020.
- [6] 王小庆. 中国农业土壤中铜和镍的生态阈值研究[D].北京:中国矿业大学, 2012.
-