



逸度模型在新污染物多介质归趋研究中的应用

吴家庆 安锡鼎 陶艳茹 庞燕 黄天寅

Application of fugacity model in the study of multi-media fate of emerging contaminants

WU Jiaqing, AN Xiding, TAO Yanru, PANG Yan, HUANG Tianyin

在线阅读 View online: <https://www.hjgejsxb.org.cn/article/doi/10.12153/j.issn.1674-991X.20240643>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于VAR模型的天津市PM_{2.5}与其他大气污染物的关系

Study on the relationship between PM_{2.5} and other air pollutants in Tianjin based on VAR model

环境工程技术学报. 2018, 8(4): 367-372. <https://doi.org/10.3969/j.issn.1674-991X.2018.04.048>

基于HYSPLIT模型的京津冀地区大气污染物输送的路径分析

Route analysis of air pollutant transport in Beijing-Tianjin-Hebei region based on HYSPLIT model

环境工程技术学报. 2018, 8(4): 359-366. <https://doi.org/10.3969/j.issn.1674-991X.2018.04.047>

SLAB模型在某工厂液氨泄漏应急响应中的应用

Application of SLAB model in liquid ammonia leakage emergency response

环境工程技术学报. 2017, 7(1): 102-106. <https://doi.org/10.3969/j.issn.1674-991X.2017.01.015>

基于COPERT模型北京市机动车大气污染物和二氧化碳排放研究

Investigation on air pollutants and carbon dioxide emissions from motor vehicles in Beijing based on COPERT model

环境工程技术学报. 2021, 11(6): 1075-1082. <https://doi.org/10.12153/j.issn.1674-991X.20210289>

受体模型在湖泊沉积物中PAHs、PFASs和OCPs源解析比较

Analysis and comparison of PAHs, PFASs and OCPs sources in lake sediments by receptor model

环境工程技术学报. 2018, 8(3): 231-240. <https://doi.org/10.3969/j.issn.1674-991X.2018.03.031>

国内外环境优先污染物筛选排序方法比较

Comparison on screening and sorting methods of environmental priority pollutants at home and abroad

环境工程技术学报. 2018, 8(4): 456-464. <https://doi.org/10.3969/j.issn.1674-991X.2018.04.060>



关注微信公众号，获得更多资讯信息

吴家庆,安锡鼎,陶艳茹,等.逸度模型在新污染物多介质归趋研究中的应用[J].环境工程技术学报,2025,15(3):1076-1086.

WU J Q,AN X D,TAO Y R,et al.Application of fugacity model in the study of multi-media fate of emerging contaminants[J].Journal of Environmental Engineering Technology, 2025, 15(3): 1076-1086.

逸度模型在新污染物多介质归趋研究中的应用

吴家庆^{1,2,3},安锡鼎^{2,3},陶艳茹^{2,3},庞燕^{2,3*},黄天寅^{1*}

1.苏州科技大学环境科学与工程学院

2.湖泊水污染治理与生态修复技术国家工程实验室,中国环境科学研究院

3.黄河流域生态保护和高质量发展联合研究中心

摘要 基于逸度方法的逸度模型不仅适用于预测新污染物在环境各介质中的浓度水平,还可以揭示区域内污染的空间分布特征,是新污染物管理中的重要工具。总结分析了逸度模型的发展历程及模型分级,将常用逸度模型依据不同区域尺度进行划分,归纳了其研究应用,探讨了逸度模型的优缺点并展望了未来的改进方向。结果显示,逸度模型在模拟新污染物归趋方面具有良好的适用性,其应用范围广泛,涵盖了从湖泊河流至区域、大陆及全球范围内新污染物的多介质归趋,学者们通过改进开发出适用特定区域或具有不同输出结果的逸度模型,将其应用于新污染物浓度模拟、长期停留时间模拟、远距离迁移模拟等方面,其预测结果较为可靠,为新污染的风险评估和控制管理提供了可靠的决策支持。当前逸度模型存在的问题包括输出结果高度依赖输入数据的可靠性、对环境条件的动态变化考虑不充足、性能验证过于依赖监测数据以及新污染物理化性质带来的较大不确定性等。未来改进需要提高污染物排放参数的准确性,并在模型参数及结构方面进行优化,完善相关的质量保证数据以提高模型的可靠性,通过模型的耦合或联用以提升模型性能。

关键词 逸度模型;新污染物;模型应用;多介质归趋

中图分类号:X52 文章编号:1674-991X(2025)03-1076-11 doi:10.12153/j.issn.1674-991X.20240643

Application of fugacity model in the study of multi-media fate of emerging contaminants

WU Jiaqing^{1,2,3}, AN Xiding^{2,3}, TAO Yanru^{2,3}, PANG Yan^{2,3*}, HUANG Tianyin^{1*}

1.School of Environmental Science and Engineering, Suzhou University of Science and Technology

2.National Engineering Laboratory for Lake Pollution Control and Ecological Restoration, Chinese Research Academy of Environmental Sciences

3.National Joint Research Center for Ecological Conservation and High Quality Development of the Yellow River Basin

Abstract The fugacity model based on the fugacity method is not only applicable to predicting the concentration levels of emerging pollutants in various environmental media, but also can reveal the spatial distribution characteristics of pollution within a region. It is an important tool in the management of emerging pollutants. We summarize and analyze the development history and classification of fugacity model, divide the common fugacity models according to different regional scales, and discuss their current research and applications. We also discuss the advantages and disadvantages of the models and propose the improvement directions. The results indicate that the fugacity model has good applicability in simulating the fate of emerging pollutants. Its application scope is broad, covering the multi-media fate of emerging pollutants from lakes and rivers to regional and global scales. Different versions of models have been developed to simulate emerging pollutant concentration, long-term residence, and long-distance migration, with relatively reliable predictive results that provide dependable decision support for risk assessment and management of emerging pollutants. The problems of current fugacity models include high dependence of output on reliability of input data, insufficient consideration of dynamic changes of

收稿日期:2024-09-28

基金项目:黄河流域生态保护和高质量发展联合研究项目(2022-YRUC-01-050203-02)

作者简介:吴家庆(2000—),男,硕士研究生,主要从事新污染物的环境行为研究,1104230059@qq.com

*通信作者:1.庞燕(1970—),女,研究员,主要从事湖泊水污染控制及生态修复研究,190068749@qq.com

2.黄天寅(1975—),男,教授,主要从事水污染控制与水环境修复研究,huangtianyin111@163.com

environmental conditions, excessive dependence of performance verification on monitoring data and large uncertainty caused by physical and chemical properties of emerging pollutants. In the future, it is necessary to improve the accuracy of pollutant emission parameters, optimize the model parameters and structure, improve the reliability of the model by improving the relevant quality assurance data, and improve the model performance by coupling or combining the models.

Key words fugacity model; emerging contaminants; model application; multi-media fate

新污染物 (ECs) 是一类相较于氨氮、化学需氧量等常规污染物对生态环境以及人体健康构成潜在威胁, 但尚无有效控制措施并且未能制定管理条例的污染物, 其主要来源于人类活动排放及化学品合成^[1]。近年来, 随着工业发展以及人类生活质量的提高, 药品、化妆品、防晒霜、食品饮料及其包装等物品在日常生活中被普遍使用, 其中的化学物质不断被释放到水环境中^[2-3], 为水污染治理带来了新的挑战。新污染物主要包括持久性有机污染物 (POPs)、内分泌干扰物 (EDCs)、抗生素以及微塑料, 此外全氟化合物、阻燃剂十溴二苯醚、杀虫剂、农药等化学品也被列入国内《重点管控新污染物清单》(2023年版)。新污染物具有长期或短期毒性、环境持久性和生物累积性等特征^[4], 例如抗生素可以诱导微生物产生耐药性, 被人体摄入后, 可能导致人体遗传物质结构发生变化, 造成致癌、致畸和致突变等后果, 严重威胁人体健康^[5-6]; 而 EDCs 能够通过饮食、皮肤、口腔和呼吸道黏膜进入人体并在体内蓄积, 当人体长期摄入 EDCs 后, 会影响机体的神经内分泌系统稳态干扰其相关激素的正常功能。已有研究表明, 甲状腺疾病的高发与 EDCs 摄入存在密切联系^[7], 新污染物带来的相关风险与危害引起了广泛关注。因此, 随着污染物种类的日益增多, 为了更好地管理水环境中的新污染物, 必须了解它们的来源、迁移行为以及与环境因素的相互作用。

新污染物的常规调查方法是借助先进的分析仪器对痕量水平的污染物进行现场监测, 然而对所有环境隔室/介质中每种污染物进行常规监测, 在空间和时间上都很繁琐且成本高昂。因此, 采用替代方法跟踪水环境中新污染物的浓度水平, 探究其多介质归趋对保护生态环境和人类健康十分必要^[8]。数学模型是一种预测工具, 可以对有限的测量数据进行补充, 对水环境中的新污染物进行风险评估。在此基础上发展而来的环境多介质归趋模型可以根据新污染物的固有特性(如水溶性、饱和蒸气压和对有机物的亲和力等)和排放特征(如不同隔室的相对和绝对尺寸、温度、悬浮物动力学以及水和空气的流速等)描述其在环境系统中可能的行为^[9], 预测

目标污染物在多介质中的化学浓度, 揭示其在环境介质中的迁移过程, 并探究影响污染物在环境中归趋的主要因素, 从而全面评估污染物在环境中的行为^[10]。

逸度模型基于逸度理论代替了传统的基于浓度的模型, 在多方面拥有明显优势。笔者总结了新污染物多介质模型的研究进展, 并重点聚焦于逸度模型的使用范围及场景, 讨论逸度模型新污染物多介质归趋研究中的缺陷及改进方向, 以期为新污染物的管理优化提供新思路和新方法。

1 逸度模型及其研究进展

早期污染物的归趋和暴露评估集中于评估单一化学物质在一种环境介质中的行为, 而忽略了部分污染物因其持久性、累积性会在环境介质之间进行迁移及积累。20世纪80年代, 为了便于对区域、全球范围内化学品在多种环境介质中迁移的特征进行研究, 环境风险评价与管理的研究不仅关注化学物质在一种介质中的迁移转化, 还关注环境介质及污染物在土壤-水-空气界面水文地质过程之间的迁移速率, 环境多介质模型开始发展^[11]。

逸度 (Fugacity) 的概念由刘易斯 (Lewis) 提出, 用于描述化学品的逃逸趋势, 化学品在任意两个相之间将从逸度较高的相向逸度较低的相扩散, 直至两相中逸度相等达到平衡, 并且具有较高逸度容量(表示污染物在该相中的分配能力^[12])的相将获得比低逸度容量的相更高的浓度。之后 Mackay^[13] 使用逸度的概念代替了传统的浓度, 提出基于逸度的环境多介质模型。逸度模型相较于浓度模型具有多方面优势: 1) 优化了模型结构并减少了参数需求。污染物在浓度多介质模型中的浓度是根据各相间的分配系数计算得出的, 但当环境结构更加复杂时, 大量的分配系数导致模拟变得困难。而逸度模型用逸度容量代替分配系数, 降低了模型参数量及计算难度, 使其在复杂环境结构下具有更好的应用。2) 便于修改环境介质及其数量。逸度模型在结构上的优势有利于研究人员对平衡方程进行编制、求解、修改, 以及增加或删减环境介质数目, 使得模型能够考虑更广泛的污染物。3) 逸度的概念增强了模型处理空间差

异性的能力,特别在描述平流和扩散等环境过程中体现出简洁和统一等优点,在大尺度的空间研究方面有着显著优势。

逸度模型输入数据主要包括目标化学品排放数据、物理化学性质以及研究区域环境参数。逸度和

浓度的线性关系在理想条件下可以表示为:

$$C=Z \times f \tag{1}$$

式中: C 为化学品在环境相中的浓度, $\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$; Z 为环境相的逸度容量, $\text{mol}/(\text{m}^3 \cdot \text{Pa})$; f 为环境相的逸度, Pa 。逸度容量在不同介质中的计算方法见表 1。

表 1 逸度容量在不同介质中的计算方法

Table 1 Formula expression of fugacity capacity in different media

环境介质	子介质	计算公式	变量含义
空气相	空气相、气溶胶相	$Z_1=(1-X_{13}) \times Z_{11}+X_{13} \times Z_{13}$ $Z_{11}=1/(R \times T)$ $Z_{13}=6 \times 106/(R \times T \times P_s)$	Z_1, Z_{11}, Z_{13} 分别为空气相及其子环境相逸度容量, $\text{mol}/(\text{m}^3 \cdot \text{Pa})$; X_{13} 为气相中固体体积分数; R 为气体常数, $8.314 \text{ Pa} \cdot \text{m}^3$; T 为温度, K ; P_s 为有机碳的密度, kg/m^3
水相	水相、悬浮颗粒物相	$Z_2=(1-X_{23}-X_{2f}-X_{2p}) \times Z_{22}+X_{23} \times Z_{23}+Z_{2f} \times X_{2f}+Z_{2p} \times X_{2p}$ $Z_{22}=1/H$ $Z_{23}=O_{23} \times K_{oc} \times \rho_{23} \times Z_{22}$	$Z_2, Z_{22}, Z_{2f}, Z_{23}$ 分别为水相及其子环境相逸度容量, $\text{mol}/(\text{m}^3 \cdot \text{Pa})$; H 为亨利定律常数, $\text{Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$; X_{23}, X_{2f}, X_{2p} 分别为水相、鱼相、植物相中固体体积分数; O_{23} 为水体中固态有机碳分数; K_{oc} 为有机碳标准分配系数; ρ_{23} 为水相中固体密度, t/m^3
沉积物相	沉积物相、沉积物颗粒相	$Z_3=(1-X_{33}) \times Z_{32}+X_{33} \times Z_{33}$ $Z_{32}=1/H$ $Z_{33}=O_{33} \times K_{oc} \times \rho_{33} \times Z_{32}$	Z_3, Z_{32}, Z_{33} 分别为沉积物相及其子环境相逸度容量, $\text{mol}/(\text{m}^3 \cdot \text{Pa})$; X_{33} 为沉积物相中固体体积分数; O_{33} 为沉积物相中固态有机碳质量分数; ρ_{33} 为沉积物相中固体密度, t/m^3

逸度模型一般包含的环境相主要有空气相、水相、沉积物相、土壤相以及它们各自的子相(表 1)。污染物进入环境系统后,在大气-植物-土壤间存在植物吸收、气-土间扩散、干湿沉降交换等迁移转化过程;由雨水冲刷、径流作用进入水体后,存在大气-水-沉积物间的迁移以及水生生物间的传递过程^[14]。

根据质量平衡以及复杂程度的不同,逸度模型

可划分为 I 至 IV 级(表 2)。I 级和 II 级为理想条件下的稳定平衡状态, III 级模型假设化学品具有非平衡分布和稳态输入, III 级模型所包含的迁移转化过程如图 1 所示。IV 级模型则假设化学品具有非稳态、非平衡输入,能够模拟污染物的非稳定排放,并得出环境系统对污染物排放变化所作出的响应时间^[15-16]。

表 2 逸度模型分级

Table 2 Levels of fugacity model

等级	特点	输入参数	质量平衡方程	优缺点	应用
I	封闭稳态平衡系统;非流动、无降解反应	化学品排放量及理化性质、环境特征参数	$M=\int \sum(V_i \times Z_i)$	过于理想化且难以准确反映真实环境情况	多环芳烃
II	开放稳态平衡系统;流动、有降解反应	化学品总排放速率、理化性质、环境特征参数、各环境介质中的迁移转化速率	$I=\sum D_{Ai} \times f+\sum D_{Ri} \times f$	过于理想化且难以准确反映真实环境情况	多环芳烃
III	开放稳态非平衡系统;流动、有降解反应	化学品在各环境介质中的排放速率、理化性质、环境特征参数、在不同介质间的迁移转化速率	$E_i+G_{Ai} \times C_{Ai}+f_i \times \sum D_{ij}=f_i \times \sum D_{ij}+D_{Rj}+D_{Ai}$	不适用于短时期内化合物浓度的变化,也不能描绘多介质环境系统中污染物随时间动态变化的情况	抗生素、多氯联苯、类固醇、多环芳烃
IV	开放动态非平衡系统;有降解反应	化学品在各环境介质中的排放速率、理化性质、环境特征参数、在不同介质间的迁移转化速率、质量随时间变化的微分方程初值流动	$V_i \times Z_i \times df_i/dt=E_i+G_{Ai} \times C_{Ai}+f_i \times \sum D_{ij}-f_i \times \sum D_{ij}+D_{Rj}+D_{Ai}$	更加贴近真实情况,但随时间变化的非稳态排放数据和环境参数难以获得	抗生素、多溴二苯醚、杀虫剂

注: M 为环境系统中污染物的总量, mol ; V_i 为相 i 的体积, m^3 ; Z_i 为相 i 的逸度容量, $\text{mol}/(\text{m}^3 \cdot \text{Pa})$; I 为研究区域中化合物的净变化通量, mol/h ; D_{Ai} 为对流过程参数, $\text{mol} \cdot \text{Pa}/\text{h}$; f 为逸度, Pa ; D_{Ri} 为反应过程参数, $\text{mol} \cdot \text{Pa}/\text{h}$; E_i 为污染物向相 i 的排放速率, mol/h ; G_{Ai} 为向相 i 流入的化合物对流速率, m^3/h ; C_{Ai} 为流入相 i 的化合物浓度, mol/m^3 ; D_{ij} 为环境相 i 向环境相 j 的迁移系数, $\text{mol}/(\text{h} \cdot \text{Pa})$ 。

尽管 IV 级逸度模型能够预测化学品未来的动态趋势,但相关的排放数据难以获得且通常需要研究人员进行估算,容易对模拟结果造成误差。随着对

化学品归趋模拟要求的提高,逸度模型动态模拟的需求不断增加,通常需要根据 IV 级逸度构建模型或在已有 III 级模型基础上进行修改升级。

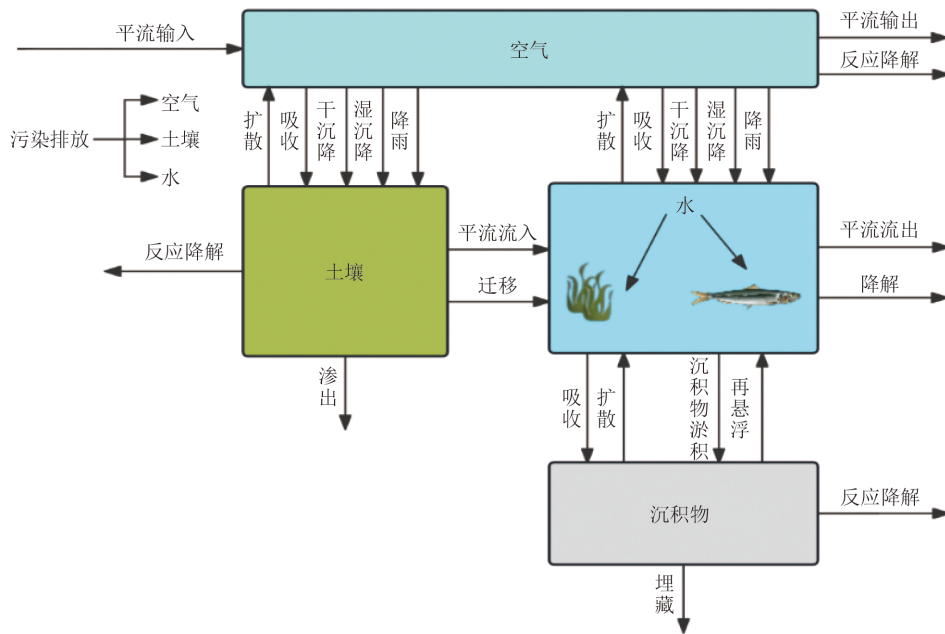


图1 Ⅲ级逸度模型结构

Fig.1 Level III fugacity model structure

2 逸度模型在新污染物多介质归趋模拟中的应用

逸度模型自开发以来经过数十年的发展完善,已逐渐趋于成熟,在多种新污染物多介质归趋研究及管理评估等领域得到广泛应用。在持久性有机污染物方面,Zhu等^[17]根据长期排放清单构建Ⅲ级逸度模型用于评估德国易北河全氟辛烷磺酸(PFOS)和全氟辛酸(PFOA)污染,预测了未来易北河的PFOS和PFOA浓度将呈现长期下降趋势,并根据健康风险评估发现环境介质中鱼类会对人体健康带来低危害风险;Qin等^[18]根据Ⅳ级逸度构建了S-L4MF模型并评估了其在空间尺度及时间尺度上的性能,将其成功应用于中国东北地区多溴二苯醚(PBDEs)的环境归趋。内分泌干扰物方面,Xu等^[19]结合化学指标和基于Ⅲ级逸度模型,预测了中国九龙江流域中的目标类固醇及其代谢物的分布和环境归趋,发现人为活动及类固醇停留时间对类固醇分布影响较大且其浓度受旱季雨季影响较大。Guo等^[20]将Ⅳ级逸度模型与湖泊水动力学耦合,构建了具有空间分异性的动态多介质模型,并成功地应用于一个再生水补给湖中的4种邻苯二甲酸酯(PAEs)的空间分布及归趋。抗生素方面,Zhang等^[21]将Ⅳ级逸度模型用于长三角青浦区,模拟了2013—2019年10种典型抗生素在空气、水、土壤和沉积物等不同环境介质中的归趋及迁移通量变化,使用敏感性分析考虑参数对结果的影响,采用蒙特卡洛法评估模型的不确定性,同时考虑了季节性环境因素(如温

度、降水量)对抗生素在多介质的分布和迁移的影响,为评估青浦区抗生素的空间分布和转化特性提供了数据支持。Liu等^[22]通过建立Ⅲ级逸度模型模拟抗生素在环境中的分布和归趋,并通过对逸度模型进行情景建模优化了抗生素生态风险(AER)的缓解策略。微塑料方面,Um等^[23]通过构建Ⅲ级逸度模型,为泻湖污水处理厂预测了关键处理步骤中废水中微塑料(MP)浓度,并发现该模型对粒径25~500 μm的MP(相较粒径>500 μm)具有较好的预测效果。

然而,总体来说我国目前新污染物环境模型方面的研究成果依旧不足,尤其是流域内新污染物多介质归趋的模型开发较少,这可能与新污染物环境行为和归趋基础研究不足有关,如缺少水气交换、水沉积物交换等污染物多介质迁移过程的研究,以及新污染物降解过程研究。相关研究数据的缺少导致符合国情的模型参数不足,降低了逸度模型的可靠性。因此开发出针对新污染物、适用于流域系统的逸度模型,对我国未来新污染物管理、流域生态管理有着重要的理论指导和现实意义。

2.1 区域尺度模型

2.1.1 QWASI模型

为了模拟湖泊和河流系统中化学物质的归趋,Mackay等^[24]开发了QWASI(Quantitative Water Air Sediment Interaction)模型即“定量水、空气和沉积物相互作用模型”。模型假设湖泊中水的混合水平一致,可以模拟污染物在空气、水和沉积物之间的迁移和转化。该模型不但用于描述湖泊中化学品在稳态

条件下的动态过程,考虑了化学品多途径输入(如直接排放、河流输入以及大气沉降)及去除(如蒸发、河流的输出、沉积物的埋藏)的综合影响^[25],还通过计算化学品在各介质中的浓度、停留时间和迁移速率,帮助研究湖泊系统中化学品的行为。

目前 QWASI 及其改进模型已被广泛应用于模拟湖泊和河流系统中化学品的浓度、分布、转移通量和生物蓄积通量。Wang 等^[26]使用 QWASI 模型模拟 PAEs 在再生水补给湖中的迁移和归趋,结果表明模拟值与实测值偏差在一个数量级内,大气输入是湖泊中邻苯二甲酸二甲酯(DMP)和邻苯二甲酸二(2-乙基己基)酯(DEHP)的主要来源,再生水补给是湖泊中邻苯二甲酸二乙酯(DEP)和邻苯二甲酸二正丁酯(DBP)的主要来源。Zhou 等^[27]对 QWASI 模型进行了调整,增加了生物区室并优化了相关参数,在此基础上模拟了白洋淀全氟烷基物质(PFASs)的迁移归趋,认为 PFASs 在重污染湖泊中迁移的主要途径是水流,其次为水-沉积物交换。Wang 等^[28]将光降解加入到 QWASI 模型中,将水相分为光解层和非光解层,模拟废水泻湖系统(利用自然净化能力或人工设施处理工业废水和生活污水的蓄水系统)中 6 种新污染物的迁移归趋,得到光降解和水转化是多数新污染物的关键去除途径。

此外,科学家还在 QWASI 模型的基础上拓展出非稳态版本,如基于 IV 级逸度的 QWSAI、DynA 及 ChimERA 模型。这些模型的引入丰富了研究框架,更全面地考虑了环境因素对化学品行为的影响。Kong 等^[29]建立了基于 IV 级逸度的 QWASI 模型,并将其用于模拟巢湖中六氯环己烷的季节变化,认为温度参数对模型输出的动态影响显著大于其他动态参数。DynA 模型考虑了日/季节性排放率和环境参数,Di 等^[30]使用 DynA 模型模拟科莫湾药物的迁移与归趋,发现药物重要的输入来自湖泊北部的平流水,而不是污水处理厂的排放,建议在流域层面大幅减少化学品排放以显著降低湖水中的浓度。Falakdin 等^[31]使用 DynA 模拟滴滴涕 (DDT) 在科莫湖的归趋,结果表明冰川及积雪融化对 DDT 浓度产生了较大贡献,而 DDT 的直接输入和沉积是该湖中 DDT 浓度相对较高的主要原因。ChimERA 是在 DynA 模型的基础上引入大型植物隔室、浮游植物隔室以及悬浮固体和溶解有机物隔室^[32]而建立的以动态空间分辨为基础的模型。Morselli 等^[33]对 ChimERA 模型进行了开发,证明了该模型能够有效评估和管理化学品在浅水系统中的行为。综上,QWASI 模型更适合用来模拟新污染物的长期留存

问题,尤其适用于湖泊系统,有助于生态风险评估和环境管理,由于参数的变化在浅水湖泊中尤为重要,部分假设为常数的参数值在实际情况中会发生极大变化,如湖泊流入相关的参数、沉积物再悬浮系数等,从而造成模型结果的偏差,因此对于这部分参数需要使用数学和实验手段来确定其值。

2.1.2 MUM 模型

为了帮助决策者制定城市环境管理策略,Diamond 研究团队根据 Mackay 的稳态 III 级逸度模型开发了多介质城市模型 MUM (Multimedia Urban Model),模型主要增加了薄膜环境介质^[34-35],主要用于探究半挥发性有机化合物(SOC)在城市中的归趋和迁移。

MUM 模型能够同时考虑城市环境中不同介质中的污染物迁移和传播,提供了更全面的环境行为模拟。Dominguez-Moruco 等^[36]将 MUM 模型成功应用于模拟西班牙加泰罗尼亚塔拉戈纳县多环芳烃的排放、归趋和迁移,得出多环芳烃在有机薄膜内的浓度最高,并会随着降解与冲洗进入河流。Liu 等^[37]运用该 MUM 模型模拟中国西北干旱地区 4 种 PAEs 的浓度分布和归趋,得出有机薄膜中 PAEs 浓度最高,大气和土壤是 PAEs 的主要汇源。Nie 等^[38]运用该模型预测了 16 种多环芳烃(PAHs)在长三角城市群的 6 个环境隔室的浓度、迁移和降解,认为空气平流对 PAHs 流动及去除的影响最大。Li 等^[39]整合土地利用分布、气象因子和水文特征等各种高分辨率和时变环境参数作为 MUM 模型输入参数,预测了 2010—2100 年上海市 16 种优先控制的 PAHs 多介质时空分布变化、迁移和降解通量,结果表明尽管平流流入和流出持续减少,但仍然是 PAHs 的主要输入和去除过程。

此外,Csiszar 等^[40]将 MUM 的空间分辨动态版本与空气污染迁移模型相结合,构建了空间导向 SO-MUM 模型。Csiszar 等^[41]使用 SO-MUM 模型预测了加拿大多伦多多氯联苯和多溴联苯醚排放量,模型预测值与实际测量值在 1 个数量级内,敏感性分析表明多溴联苯醚较多氯联苯对干沉降速度参数更为敏感。

2.1.3 BETR 模型

为了研究较大的空间异质区域,2001 年 MacLeod 等^[42]提出了基于逸度理论的区域划分的 BETR (Berkeley-Trent) 模型。该模型不但考虑了区域的地理特征、化学品使用模式等因素,还利用地理信息系统 (GIS) 技术,简化了研究区域内河流流量及流向计算^[43]。在此基础上,Toose 等^[44]结合环境系统、地理

边界和气候条件发展出适用于全球范围的 BETR-Global、BETR-Wrold 模型。后来各国学者又开发出 Chemfrance(法国)、G-CIEMS(日本)、ChemCAN(加拿大)和 CHEMGL(北美五大湖)等模型,用于特定国家范围内区域性化学品环境多介质归趋模拟。其中具有代表性的是 G-CIEMS 模型,它是一种结合 GIS 技术的高空间分辨率动态多介质逸度模型,适用于较为复杂区域内化学物质分布的模拟研究^[45]。

在我国, Song 等^[46]将 BETR 模型改进为 BETR-Urban-Rural(BETR-城乡模型),通过空气和土壤介质进行城市与农村的划分,区分了城乡之间化学品排放、迁移过程和分布的差异,使其更适用于模拟城市与农村之间污染物的迁移。Su 等^[47]利用 BETR-Urban-Rural 模型,动态模拟了 1981—2050 年中国环渤海地区全氟辛烷磺酸迁移归趋,结果表明沿海水域、土壤和淡水是所有选定区域全氟辛烷磺酸的最终汇。Su 等^[48]还使用模型模拟 1980—2020 年苯并[a](BaP)的多介质归趋,发现农村排放量显著高于城市,但城市空气和土壤中 BaP 的环境暴露浓度普遍高于农村地区。

以上研究表明, BETR 模型考虑了空间上的大气迁移及地表径流迁移,其在较大范围内的污染物归趋模拟中具有优势。

2.1.4 EQC 模型

加拿大环境建模和化学品中心建立了 EQC (Equilibrium Criterion) 模型,用于量化评估环境系统中化学品的行为。该模型可以进行危险评估、制定监测策略,拥有更广泛处理各类化学品的能力^[49],对新污染物的迁移归趋模拟有较好的应用。Qanungo 等^[50]使用 EQC 模型对溴唑醇在环境中的分布及归趋进行 I 级逸度模拟,认为溴唑醇主要分布于土壤和水中,而溴康唑在气溶胶中的浓度最高。O'Driscoll 等^[51]使用 EQC 模型对中国台湾省西部和沿海地区 PBDEs 进行区域性迁移模拟,认为沉积物和土壤是 PBDEs 的主要汇,并且在空气中具有一定的远距离迁移能力,需要尽快限制 PBDEs 的生产和使用,以避免未来在沉积物中形成源区。Jiang 等^[52]采用 EQC Level III 模型模拟了甲基硅氧烷 CMSs(D4~D6)在城市环境空气、水、土壤和沉积物之间的迁移和转化过程,发现低温更有利于 CMSs 在环境系统中滞留,建议要更多地关注低温城市 CMSs 的环境行为和居民暴露风险。

TaPL3 模型是基于 EQC 模型开发的用于评估化学品在稳态环境的空气或水中远距离潜在迁移和持久性的工具。该模型没有由空气、水和沉积物掩

埋产生的平流损失^[53],可以计算化学品的持久性和特征传播距离(CTD)。Qi 等^[54]使用 TaPL3 模型计算了多环芳烃及其衍生物对空气和水的 CTD 和持久性,认为空气中多环芳烃及其衍生物的 CTD 表现出明显的季节性变化,冬春季的 CTD 高于夏秋季。Hu 等^[55]使用 TaPL3 模型计算 16 种多环芳烃的特征传播距离,表明 Phe(菲)、Pyr(芘)、Chr(屈)、Ant(蒽)及 Flu(芴)的传播距离最远,均超过 1 000 km。总体来说, EQC 模型可用于估算持久性有机污染物的特征迁移距离,同时可以明确距离与持久性之间的简单关系。

2.2 全球尺度模型

2.2.1 Global-POP、BETR-Global 模型

Global-POP 模型是一种根据 III 级逸度质量平衡方法制定的全球尺度空间模型,其将全球环境划分为不同纬度带,对陆地区域进行划分,并将发射速率、隔室 Z 值、平流交换 D 值和温度定义为受季节变化影响的时间函数,同时将化学浓度也定义为时间的函数^[56]。

BETR-Global 是 BETR 空间分辨多介质归趋模型的一种,在 Python 编程语言版本为 BETR-Research^[56],该模型被用于全球不同化学品的模拟。Wohrnschimmel 等^[57]使用 BETR-Global 模型模拟了 1950—2050 年 α -六氯环己烷、 β -六氯环己烷这 2 种异构体的全球归趋和迁移,得出 β -六氯环己烷因其更高的持久性,最终将成为环境中六氯环己烷的主要异构体。Vudamala 等^[58]使用 BETR-Global 模型模拟多氯联苯同系物(PCB)在南大洋空气-海水交换过程,结果发现与 PCB28 相比,南大洋是 PCB153 更强的吸收汇。Chen 等^[59]使用 BETR-Global 模型模拟了 1930—2020 年氯化石蜡(CP)的全球迁移。可见,该模型可以有效估算新污染物通过大气和海洋进行远距离迁移的潜力及其对全球陆地和海洋系统污染的影响。

2.2.2 ChemRange、CliMoChem 模型

1996 年, Scheringer^[60]开发了一种全球尺度的一维稳态(III 级逸度)长距离迁移模型,即 ChemRange 模型,其主要关注空间分布过程,适用于中等和高度持久性化学品。Fenner 等^[61]使用 ChemRange 对 70 种化学品进行了持久性和远距离迁移潜力计算,包括 24 种不同的多氯联苯同系物,10 种持久性有机污染物及其 2 种转化产物,以及其他 34 种高产量化学品(HPV),结果表明除六氯苯和灭蚁灵外,多氯联苯和其他持久性有机污染物的持久性值为中到高,

而空间范围较小。

CliMoChem 模型是基于 Globo-POP 和 ChemRange 两个模型开发而来,主要用于模拟化学品在全球环境中的迁移过程以及行为。该模型可以同时计算母体化合物和转化产物在环境的分布及其介质归趋。Becker 等^[62]使用 CliMoChem 模型计算了杀虫剂硫丹(α 和 β 异构体)及其降解产物硫丹硫酸盐在空气、海水和土壤中的浓度,结果显示模型预测的空气、海水和土壤中 α 与 β 硫丹和硫丹硫酸盐的浓度与环境实测浓度一致。Boucher 等^[63]通过 CliMoChem 估算全氟磺酸及相关前体的全球环境浓度,认为全氟己磺酰氟和全氟癸磺酰氟及其衍生物的环境浓度升高预计将持续几十年,远离源区的区域甚至尚未达到其估计的峰值浓度。

2.3 多尺度模型(SimpleBox 模型)

SimpleBox 模型是一个包括 3 个空间尺度(区域、大陆和全球)和 3 个气候带的多介质归趋模型^[64],该模型被纳入欧盟委员会的化学品注册、评估、授权和限制监管框架(REACH),是预测区域环境背景浓度的基础^[65]。与逸度方法不同,SimpleBox 模型中化学品的质量流量和浓度是基于浓度的“活塞速度”型传质系数,单位为(m/s),而不是基于逸度的“电导率”型系数^[66]。SimpleBox 4.0 为目前最新版本,Wang 等^[67]采用 SimpleBox 4.0 模拟了北极持久性有机污染物 POP 的归趋,估算了欧洲大陆和北

美大陆 POP 排放对北极 POP 污染的影响,结果表明 SimpleBox 估算的大气浓度与测量浓度非常吻合。Thunnissen 等^[68]使用 SimpleBox 区域尺度排放场景模拟吡虫啉浓度,发现预测浓度和测量浓度之间存在密切关系,SimpleBox 能够利用排放数据估计吡虫啉浓度。Quik 等^[69]引入 SimpleBox4Plastic 模型来模拟纳米塑料和微塑料的环境归趋,对其进行环境浓度预测并进行模型验证,结果表明尽管部分测量值与模型预测的区域背景值存在差异,预测结果存在一定不确定性,但模型中迁移过程和跨介质的相对分布的推断是可靠的。

2.4 模型适用条件、局限及其改进方向

选择合适的模型对研究结果的正确性和准确性至关重要。模型选择时,需要结合研究化学品的性质、研究区域以及模型优缺点,综合考虑选择出最符合条件的模型。在复杂情境下,可能还需要结合不同类型的模型或采用综合方法,更全面地评估环境中化学物质的行为和潜在影响。

随着逸度模型的不断开发,其种类达到数十种,主要应用于药物和个人护理品、全氟化合物、多环芳烃、激素、多氯联苯类化学品的模拟。逸度模型包含了对分配、富集、降解等过程的详细描述,因此对新污染物的环境归趋有很好的模拟效果。本文对比了各类逸度模型的应用条件、其各自局限性和改进方向,结果见表 3 及表 4。

表 3 常用逸度模型的应用

Table 3 Application of common fugacity models

模型名称	主要环境介质	污染物类型	模型应用
SimpleBox ^[69-70]	大气、淡水和海水、淡水和海水沉积物、自然土壤、农业土壤及其他土壤	持久性有机污染物、微塑料	纳米微塑料、吡虫啉等
QWASI ^[23,26-27,71]	空气、水、沉积物、动植物群	持久性有机污染物、抗生素、内分泌干扰物、微塑料	微塑料、全氟和多氟烷基物质、雌激素等
MUM(SO-MUM) ^[72-73]	空气、土壤、植被、地表水、沉积物、有机薄膜	持久性有机污染物	有机磷酸酯、多环芳烃等
BETR-Urban-Rural ^[48,74]	上层空气、城市空气、农村空气、植被、城市土壤、农村土壤、淡水、沿岸水、沉积物	持久性有机污染物	多环芳烃、全氟辛烷磺酸等
EQC ^[37,51,75]	空气、土壤、水、沉积物	持久性有机污染物、微塑料	邻苯二甲酸酯、多溴二苯醚、微塑料等
TaPL3 ^[55]	空气、土壤、水、沉积物	持久性有机污染物	邻苯二甲酸酯等
CliMoChem ^[63-64]	空气、森林冠层、森林土壤、农业土壤、淡水、沿海水、沉积物	持久性有机污染物	DDT、全氟和多氟烷基物质等
BETR-Global ^[59-60]	空气、水、土壤、沉积物	持久性有机污染物	多氯联苯、氯化石蜡等

此外,逸度模型在新污染物的应用方面仍存在以下不足,未来需要进一步改进:1)对于缺少监测、排放或难以获得的数据往往采取估算、从文献中获取的方法,如采用他人水质数据,从文献、通用参数数据中获得沉积物相关参数(如沉积物埋藏、沉积和

再悬浮速率),仅在有限数量的研究中实际测量了相关的参数,参数的粗略输入会导致模型产生较大偏差。2)模型未能充分考虑环境条件的动态变化,如温度、湿度和污染物浓度等参数的变化,模型参数如水量、水温、风速和生物量受空间和时间变化的影

表4 常用逸度模型局限性及其改进方向

Table 4 Limitations of commonly used fugacity models and their improvement directions

模型名称	局限性	改进方向
QWASI ^[29,31]	目前版本仅支持静态污染模拟,未考虑湖泊环境的特殊水文特征	构建温度相关多介质模型,并根据环境特性增设冰雪介质
MUM ^[70]	建筑环境和气候参数都强烈影响着污染物的归趋行为	构建相关指数用于描述建筑环境及表面性质对污染物沉降的影响,以控制参数对结果的影响
BETR-Urban-Rural ^[74]	区间尺寸、城市缓冲距离等参数显著影响模型输出;建模值因区间网格化特性通常低于实际值	通过缩小尺度、设置适合的空间分辨率、增设植被介质等以提高模型精度
EQC ^[37,51]	仅适用于不可电离的有机化学品,无法准确反映实际环境中的复杂性和变化性且在描述动态过程上存在一定局限性	将EQC模型与其他质量平衡模型进行联用,或在模型中内嵌风险评估等模型
TaPL3 ^[55]	风速、温度等参数会导致模型计算的特征迁移距离(CTD)产生偏差	根据季节变化对温度参数进行调整或构建随时间动态变化的温度参数
CliMoChem ^[62]	季节波动会影响污染物在环境介质的净沉积量,纬度排放分布相会导致对北极大气浓度的高估和热带地区大气浓度的低估	根据季节的不同设置冰雪介质,调整适合的空气-土壤比和排放物的纬度分布
BETR-Global ^[56]	原始版本空间分辨率较为粗略(15°×15°),因此不适合于解析由城市中心向偏远地区的浓度梯度	进一步提高模型的空间分辨率,通过构建动态运行模型以获得较稳态运行更为精确的模拟结果
SimpleBox ^[67]	模型受污染物排放率及空气降解速率参数影响较大,不精确的参数估算会导致结果偏差较大	选择或构建更为适合的排放率估算方法以及将北极冰雪介质加入模型中以精确污染物排放量,同时需要考虑温度对各介质降解半衰期的影响

响,这可能会产生不确定性。此外一些考虑不足的因素都会导致模型的偏差,包括未能将关键环境介质如冰雪、悬浮物等考虑在内,忽视可能存在污染物二次排放的情况等。3)模型的验证和校准通常依赖于有限的观测数据,而模型输出结果通常为平均值,可能无法全面反映实际情况,同样会影响模型的可靠性和应用效果。4)目标新污染物的物理化学性质可能是逸度建模中不确定性的来源。尽管有研究指出物理化学性质可以以合理的精度进行预测,并且对逸度模型的输出影响很小^[70],但模型的敏感性分析表明,化学性质尤其是降解速率/半衰期和吸附相关系数与模型输出的不确定性及准确性密切相关。

3 结论与展望

逸度模型是了解环境系统中新污染归趋的重要工具,在新污染物风险评估、控制管理等方面得到了广泛的应用。一方面逸度模型可以将不同环境介质内和跨介质新污染物的迁移转化过程相联系,用于预测新污染物在不同环境介质中的分布情况,帮助评估其环境影响,以及模拟新污染物在环境中的迁移路径和化学转化过程,了解其长期环境归趋;另一方面逸度模型能用于评估新污染物的环境风险,包括对生态系统和人类健康的潜在威胁,以及为制定和优化环境政策与监管标准提供科学依据。但逸度模型目前依然存在多方面的缺点,包括过于理想化的假设、较大的数据依赖性,以及无法应对较为复杂的新污染物。

为提高模型模拟精度,未来逸度模型在新污染物多介质模拟研究中可开展如下研究。

(1)调整参数及结构。不同的环境因素(温度、

气候等)可能导致逸度模型部分关键参数(降解率等)产生较大变化,因此研究人员需要根据实际情况对模型进行修改,包括建立随时间变化的环境参数、修改相应的环境介质以及评估关键参数对模型输出的影响程度等,此外将动力学参数作为逸度模型输入可以减少不适当的模型输入来源引起的模型不确定性。

(2)提高排放参数准确性。污染物排放量作为模型模拟的关键参数对于模型结果有重大影响,排放数据的不足以及排放估算方法的不同通常导致较大的模型误差,需要选择合适的方法以获得更为精确的排放量,或者可以在不同的排放速率下分析模型输出,以找到被研究系统的边界条件。此外通过规范排放量的定义和计算方法将其与模型结合,建立统一的排放量估算模式能够更好地实现模型源汇模拟功能,提供更为可靠的数据支持。

(3)完善相关模型质量保证数据。例如误差、标准偏差等应包括在未来逸度模型性能评估中。此外还应谨慎考虑模拟迭代次数,通常在蒙特卡罗模拟中较大运行次数提供更高的准确度,运行次数应足以证明结果的统计学相关性。同时应提供统计学证据,以证明样本量的增加不会显著影响输出概率分布。

(4)耦合或联用相关模型。逸度模型通常基于所有环境介质完全均匀的假设,通过模型耦合能够使相关模拟过程更为符合实际。例如耦合 HYDRUS-1D 模型以模拟污染物作为随水流动的溶质的吸附、降解和浸出的动态过程;耦合二维网格化水动力模型以构建具有空间分化特征的动态多介质模型,模拟污染物在非均质水体中的归趋;耦合生物累积模

型以模拟吸收和净化过程,以及有机化学物质在生物体中的积累。未来可以继续开发模型耦合研究或将逸度模型与多种模型同时耦合,以从各个方面提升模型性能。

参考文献

- [1] 刘琛,顾晓云,陈杰. 基于文献计量学的河流中抗生素与内分泌干扰物研究热点分析[J]. 环境工程技术学报, 2024, 14(3): 907-920.
LIU C, GU X Y, CHEN J. Analysis of research hotspots on antibiotics and endocrine disruptors in rivers based on bibliometrics[J]. Journal of Environmental Engineering Technology, 2024, 14(3): 907-920.
- [2] RICHARDSON S D, KIMURA S Y. Emerging environmental contaminants: challenges facing our next generation and potential engineering solutions[J]. Environmental Technology & Innovation, 2017, 8: 40-56.
- [3] RATHI B S, KUMAR P S, SHOW P L. A review on effective removal of emerging contaminants from aquatic systems: current trends and scope for further research[J]. Journal of Hazardous Materials, 2021, 409: 124413.
- [4] 许婧,余丽,李卫华,等. 水环境中新污染物研究进展[J]. 环境科学与管理, 2023, 48(2): 65-70.
XU J, YU L, LI W H, et al. Research progress of emerging contaminants in water[J]. Environmental Science and Management, 2023, 48(2): 65-70.
- [5] 敖蒙蒙,魏健,陈忠林,等. 四环素类抗生素环境行为及其生态毒性研究进展[J]. 环境工程技术学报, 2021, 11(2): 314-324.
AO M M, WEI J, CHEN Z L, et al. Research progress on environmental behaviors and ecotoxicity of tetracycline antibiotics[J]. Journal of Environmental Engineering Technology, 2021, 11(2): 314-324.
- [6] KASONGA T K, COETZEE M A A, KAMIKA I, et al. Endocrine-disruptive chemicals as contaminants of emerging concern in wastewater and surface water: a review[J]. Journal of Environmental Management, 2021, 277: 111485.
- [7] 姜宪娟,王丽虹,许征,等. 消费品中的环境内分泌干扰物(EDCs)及其对健康的危害[J]. 检验检疫学刊, 2018, 28(6): 52-55.
JIANG X J, WANG L H, XU Z, et al. The endocrine disrupting chemicals in consumer products and their effects on humans health[J]. Journal of Inspection and Quarantine, 2018, 28(6): 52-55.
- [8] ALDEKOA J, MARCÉ R, FRANCÉS F. Fate and degradation of emerging contaminants in rivers: review of existing models[M]//Emerging Contaminants in River Ecosystems. Cham: Springer International Publishing, 2015: 159-193.
- [9] WHELAN M J, KIM J. Application of multimedia models for understanding the environmental behavior of volatile methylsiloxanes: fate, transport, and bioaccumulation[J]. Integrated Environmental Assessment and Management, 2022, 18(3): 599-621.
- [10] ZHANG R R, ZHAN C S, HE Z P, et al. Review of environmental multimedia models[J]. Environmental Forensics, 2012, 13(3): 216-224.
- [11] McKONE T E, MacLEOD M. Tracking multiple pathways of human exposure to persistent multimedia pollutants: regional, continental, and global-scale models[J]. Annual Review of Environment and Resources, 2003, 28: 463-492.
- [12] PARNIS J M, MACKAY D. Multimedia environmental models: the fugacity approach[M]. Third edition. Boca Raton, FL: CRC Press, 2020 : CRC Press, 2020.
- [13] MACKAY D. Finding fugacity feasible[J]. Environmental Science & Technology, 1979, 13(10): 1218-1223.
- [14] SHARPE S, MACKAY D. A framework for evaluating bioaccumulation in food webs[J]. Environmental Science & Technology, 2000, 34(12): 2373-2379.
- [15] MACKAY D, PATERSON S, CHEUNG B, et al. Evaluating the environmental behavior of chemicals with a level III fugacity model[J]. Chemosphere, 1985, 14(3/4): 335-374.
- [16] LU Z Y, TIAN W J, CHEN Z, et al. Release of PAHs from sediments to seawater under wave: indoor microcosms and level IV fugacity models[J]. Journal of Hazardous Materials, 2024, 474: 134799.
- [17] ZHU X, LI H, LUO Y, et al. Evaluation and prediction of anthropogenic impacts on long-term multimedia fate and health risks of PFOS and PFOA in the Elbe River Basin[J]. Water Research, 2024, 257: 121675.
- [18] QIN M, MA W L, YANG P F, et al. A level IV fugacity-based multimedia model based on steady-state particle/gas partitioning theory and its application to study the spatio-temporal trends of PBDEs in atmosphere of NorthEast China[J]. Science of the Total Environment, 2024, 909: 168622.
- [19] XU R, LIU S, CHEN H, et al. An effective tool for tracking steroids and their metabolites at the watershed level: combining fugacity modeling and a chemical indicator[J]. Environmental Pollution, 2023, 326: 121499.
- [20] GUO Y Q, WANG C C, HUANG P P, et al. A method for simulating spatial fates of chemicals in flowing lake systems: application to phthalates in a lake[J]. Water Research, 2023, 232: 119715.
- [21] ZHANG Z B, DUAN Y P, ZHANG Z J, et al. Multimedia fate model and risk assessment of typical antibiotics in the integrated demonstration zone of the Yangtze River Delta, China[J]. Science of the Total Environment, 2022, 805: 150258.
- [22] LIU H, SHAN X, SONG L T, et al. An integrated multimedia fate modeling framework for identifying mitigation strategy of antibiotic ecological risks: a case study in a peri-urban river[J]. Environmental Research, 2023, 238: 117225.
- [23] UM M, WEERACKODY D, GAO L, et al. Investigating the fate and transport of microplastics in a lagoon wastewater treatment system using a multimedia model approach[J]. Journal of Hazardous Materials, 2023, 446: 130694.
- [24] MACKAY D, PATERSON S, JOY M. A quantitative water, air, sediment interaction (QWASI) fugacity model for describing the fate of chemicals in rivers[J]. Chemosphere, 1983, 12(9/10): 1193-1208.

- [25] MACKAY D, HICKIE B. Mass balance model of source apportionment, transport and fate of PAHs in Lac Saint Louis, Quebec[J]. *Chemosphere*, 2000, 41(5): 681-692.
- [26] WANG C C, LI J, QIU C S, et al. Multimedia fates and ecological risk control strategies of phthalic acid esters in a lake recharged by reclaimed water using the QWASI fugacity model[J]. *Ecological Modelling*, 2023, 475: 110222.
- [27] ZHOU Y Q, YANG L, WANG T Y, et al. Optimizing the fugacity model to select appropriate remediation pathways for perfluoroalkyl substances (PFASs) in a lake[J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2022, 438: 129558.
- [28] WANG Y F, KHAN S J, FAN L H, et al. Application of a QWASI model to produce validated insights into the fate and transport of six emerging contaminants in a wastewater lagoon system[J]. *Science of the Total Environment*, 2020, 721: 137676.
- [29] KONG X Z, XU F L, HE W, et al. Development of level-IV fugacity-based QWASI model for dynamic multimedia fate and transport processes of HCHs in Lake Chaohu, China[M]//*Ecological Modelling and Engineering of Lakes and Wetlands*. Amsterdam: Elsevier, 2014: 35-73.
- [30] Di GUARDO A, CASTIGLIONI S, GAMBINO I, et al. Modelling micropollutant cycle in Lake Como in a winter scenario: implications for water use and reuse, ecosystem services, and the EU zero pollution action plan[J]. *Science of the Total Environment*, 2024, 906: 167594.
- [31] FALAKDIN P, TERZAGHI E, Di GUARDO A. Predicting the contribution of a local emission source in mid-range transport of DDT and its deposition in terrestrial and aquatic ecosystems in Northern Italy[J]. *Science of the Total Environment*, 2023, 889: 164038.
- [32] CHRISTENSEN E R, WANG Y, HUO J W, et al. Properties and fate and transport of persistent and mobile polar organic water pollutants: a review[J]. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 2022, 10(2): 107201.
- [33] MORSELLI M, TERZAGHI E, GALIMBERTI F, et al. Pesticide fate in cultivated mountain basins: the improved DynAPlus model for predicting peak exposure and directing sustainable monitoring campaigns to protect aquatic ecosystems[J]. *Chemosphere*, 2018, 210: 204-214.
- [34] LAW N L, DIAMOND M L. The role of organic films and the effect on hydrophobic organic compounds in urban areas: an hypothesis[J]. *Chemosphere*, 1998, 36(12): 2607-2620.
- [35] CSISZAR S A, DIAMOND M L, THIBODEAUX L J. Modeling urban films using a dynamic multimedia fugacity model[J]. *Chemosphere*, 2012, 87(9): 1024-1031.
- [36] DOMÍNGUEZ-MORUECO N, DIAMOND M L, SIERRA J, et al. Application of the Multimedia Urban Model to estimate the emissions and environmental fate of PAHs in Tarragona County, Catalonia, Spain[J]. *Science of the Total Environment*, 2016, 573: 1622-1629.
- [37] LIU Y Y, TIAN F F, GU H X, et al. Pollution status and multimedia fate simulation of phthalate acid esters (PAEs) in an arid city[J]. *Polish Journal of Environmental Studies*, 2016, 25(1): 325-331.
- [38] NIE N, LI T, MIAO Y Y, et al. Environmental fate and health risks of polycyclic aromatic hydrocarbons in the Yangtze River Delta Urban Agglomeration during the 21st century[J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2024, 465: 133407.
- [39] LI T, NIE N, MIAO Y Y, et al. Spatiotemporal distribution and inter-media transfer of polycyclic aromatic hydrocarbons in Shanghai, China: historical patterns and future trends[J]. *Science of the Total Environment*, 2024, 945: 173938.
- [40] CSISZAR S A, DAGGUPATY S M, VERKOEYEN S, et al. SO-MUM: a coupled atmospheric transport and multimedia model used to predict intraurban-scale PCB and PBDE emissions and fate[J]. *Environmental Science & Technology*, 2013, 47(1): 436-445.
- [41] CSISZAR S A, DIAMOND M L, DAGGUPATY S M. The magnitude and spatial range of current-use urban PCB and PBDE emissions estimated using a coupled multimedia and air transport model[J]. *Environmental Science & Technology*, 2014, 48(2): 1075-1083.
- [42] MacLEOD M, WOODFINE D G, MACKAY D, et al. BETR North America: a regionally segmented multimedia contaminant fate model for North America[J]. *Environmental Science and Pollution Research International*, 2001, 8(3): 156-163.
- [43] MacLEOD M, WOODFINE D, BRIMACOMBE J, et al. A dynamic mass budget for toxaphene in North America[J]. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 2002, 21(8): 1628-1637.
- [44] TOOSE L, WOODFINE D G, MacLEOD M, et al. BETR-world: a geographically explicit model of chemical fate: application to transport of α -HCH to the Arctic[J]. *Environmental Pollution*, 2004, 128(1/2): 223-240.
- [45] SUZUKI N, MURASAWA K, SAKURAI T, et al. Geo-referenced multimedia environmental fate model (G-CIEMS): model formulation and comparison to the generic model and monitoring approaches[J]. *Environmental Science & Technology*, 2004, 38(21): 5682-5693.
- [46] SONG S, SU C, LU Y L, et al. Urban and rural transport of semivolatile organic compounds at regional scale: a multimedia model approach[J]. *Journal of Environmental Sciences*, 2016, 39: 228-241.
- [47] SU C, LU Y L, WANG T Y, et al. Dynamic multimedia fate simulation of Perfluorooctane Sulfonate (PFOS) from 1981 to 2050 in the urbanizing Bohai Rim of China[J]. *Environmental Pollution*, 2018, 235: 235-244.
- [48] SU C, ZHENG D F, ZHANG H, et al. The past 40 years' assessment of urban-rural differences in Benzo [a] Pyrene contamination and human health risk in coastal China[J]. *Science of the Total Environment*, 2023, 901: 165993.
- [49] HUGHES L, MACKAY D, POWELL D E, et al. An updated state of the science EQC model for evaluating chemical fate in the environment: application to D5 (decamethylcyclopentasiloxane)[J]. *Chemosphere*, 2012, 87(2): 118-124.
- [50] QANUNGO K, THAKUR A. An EQC Level I study of environmental partitioning of Bromoconazole[J]. *Materials*

- Today: Proceedings, 2022, 68: 932-936.
- [51] O'DRISCOLL K, ROBINSON J, CHIANG W S, et al. The environmental fate of polybrominated diphenyl ethers (PBDEs) in western Taiwan and coastal waters: evaluation with a fugacity-based model[J]. *Environmental Science and Pollution Research*, 2016, 23: 13222-13234.
- [52] JIANG Y, GUO J, ZHOU Y, et al. Occurrence and behavior of methylsiloxanes in urban environment in four cities of China[J]. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 2022, 19(21): 13869
- [53] BEYER A, MACKAY D, MATTHIES M, et al. Assessing long-range transport potential of persistent organic pollutants[J]. *Environmental Science & Technology*, 2000, 34(4): 699-703.
- [54] QI A N, WANG P C, LV J H, et al. Distributions of PAHs, NPAHs, OPAHs, BrPAHs, and ClPAHs in air, bulk deposition, soil, and water in the Shandong Peninsula, China: urban-rural gradient, interface exchange, and long-range transport[J]. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 2023, 265: 115494.
- [55] HU T P, MAO Y, KE Y P, et al. Spatial and seasonal variations of PAHs in soil, air, and atmospheric bulk deposition along the plain to mountain transect in Hubei province, Central China: air-soil exchange and long-range atmospheric transport[J]. *Environmental Pollution*, 2021, 291: 118139.
- [56] WANIA F, MACKAY D. Modelling the global distribution of toxaphene: a discussion of feasibility and desirability[J]. *Chemosphere*, 1993, 27(10): 2079-2094.
- [57] WÖHRNSCHIMMEL H, TAY P, von WALDOW H, et al. Comparative assessment of the global fate of α - and β -hexachlorocyclohexane before and after phase-out[J]. *Environmental Science & Technology*, 2012, 46(4): 2047-2054.
- [58] VUDAMALA K, CHAKRABORTY P, PRIYANKA, et al. Polychlorinated biphenyls in the surface and deep waters of the Southern Indian Ocean and Coastal Antarctica[J]. *Chemosphere*, 2024, 364: 143241.
- [59] CHEN C K, LI L, ZHANG S X, et al. Modeling global environmental fate and quantifying global source-receptor relationships of short-, medium-, and long-chain chlorinated paraffins[J]. *Environmental Science & Technology Letters*, 2024, 11(6): 626-633.
- [60] SCHERINGER M. Persistence and spatial range as endpoints of an exposure-based assessment of organic chemicals[J]. *Environmental Science & Technology*, 1996, 30(5): 1652-1659.
- [61] FENNER K, SCHERINGER M, HUNGERBÜHLER K. Prediction of overall persistence and long-range transport potential with multimedia fate models: robustness and sensitivity of results[J]. *Environmental Pollution*, 2004, 128(1/2): 189-204.
- [62] BECKER L, SCHERINGER M, SCHENKER U, et al. Assessment of the environmental persistence and long-range transport of endosulfan[J]. *Environmental Pollution*, 2011, 159(6): 1737-1743.
- [63] BOUCHER J M, COUSINS I T, SCHERINGER M, et al. Toward a comprehensive global emission inventory of C₄-C₁₀ perfluoroalkanesulfonic acids (PFASs) and related precursors: focus on the life cycle of C₆- and C₁₀-based products[J]. *Environmental Science & Technology Letters*, 2019, 6(1): 1-7.
- [64] MEENT D. Simplebox: a generic multimedia fate evaluation model[M]. Bilthoven, the Netherlands: National Institute of Public Health and Environmental Protection, 1993.
- [65] ECHA. Guidance on information requirements and chemical safety assessment chapter R.14: occupational exposure assessment[EB/OL]. [2024-12-20]. <https://echa.europa.eu/>.
- [66] BRANDES L J, DEN HOLLANDER H. SimpleBox 2.0: a nested multimedia fate model for evaluating the environmental fate of chemicals[EB/OL]. [2024-12-20]. <https://echa.europa.eu/>.
- [67] WANG J Q, HOONDEERT R P J, THUNNISSEN N W, et al. Chemical fate of persistent organic pollutants in the Arctic: evaluation of simplebox[J]. *Science of the Total Environment*, 2020, 720: 137579.
- [68] THUNNISSEN N W, LAUTZ L S, van SCHAIK T W G, et al. Ecological risks of imidacloprid to aquatic species in the Netherlands: measured and estimated concentrations compared to species sensitivity distributions[J]. *Chemosphere*, 2020, 254: 126604.
- [69] QUIK J T K, MEESTERS J A J, KOELMANS A A. A multimedia model to estimate the environmental fate of microplastic particles[J]. *Science of the Total Environment*, 2023, 882: 163437.
- [70] HAWKER D W, CUMMING J L, NEALE P A, et al. A screening level fate model of organic contaminants from advanced water treatment in a potable water supply reservoir[J]. *Water Research*, 2011, 45(2): 768-780.
- [71] SHEN J, LI X Y, WANG X Z, et al. Production, removal and fate of steroid estrogens under the background of total sewage interception in the Erhai Lake Basin, China[J]. *Environmental Pollutants and Bioavailability*, 2020, 32(1): 194-206.
- [72] RODGERS T F M, GIANG A, DIAMOND M L, et al. Emissions and fate of organophosphate esters in outdoor urban environments[J]. *Nature Communications*, 2023, 14(1): 1175.
- [73] PI W, QU C K, DING Y, et al. Cross-media transfer of polycyclic aromatic hydrocarbons in the Naples metropolitan area, Southern Italy[J]. *Science of the Total Environment*, 2024, 941: 173695.
- [74] SU C, SONG S, LU Y L, et al. Potential effects of changes in climate and emissions on distribution and fate of perfluorooctane sulfonate in the Bohai Rim, China[J]. *Science of the Total Environment*, 2018, 613: 352-360.
- [75] UCKAN A Y, TÜRKAN M K, İMAMOĞLU İ. Interaction of microplastics with organics: ecosystem impacts and equilibrium modeling[C/OL]// The 6th EurAsia Waste Management Symposium. [2024-05-01]. <https://www.eurasiasymposium.com/>. ◇