

陆海统筹背景下的新污染物环境多介质空间分异模型

解怀君, 刘昱宏, 闫振辉, 李雪花, 陈景文

(大连理工大学 环境学院, 大连市化学品风险防控及污染防治技术重点实验室, 工业生态与环境工程教育部重点实验室, 辽宁 大连 116024)

摘要:新污染物治理及风险防控是国家重大需求。开展新污染物治理需评估其环境暴露,然而利用环境监测手段评价大尺度区域污染特征所需成本高,且难以全面、系统地反映污染物的环境归趋。多介质环境模型可以对新污染物的迁移、转化及环境归趋进行准确描述,是进行新污染物环境暴露评价的有效工具。与传统多介质环境模型相比,环境多介质空间分异模型具有分辨率高、精度高、可反映污染物分布的空间差异性等优点。海洋是新污染物重要的汇,构建陆海统筹的环境多介质空间分异模型势在必行。本文概述了当前国内外面向新污染物环境暴露评价的环境多介质空间分异模型,并对模型构建流程、相关参数获取方法及未来研究前景进行了综述。

关键词:新污染物; 环境多介质空间分异模型; 环境暴露

中图分类号:X55

文献标识码:A

文章编号:1007-6336(2024)06-0841-09

Review of spatially environmental multimedia fate models of emerging pollutants in the context of land and sea coordination

XIE Huaijun, LIU Yuhong, YAN Zhenhui, LI Xuehua, CHEN Jingwen

(Dalian Key Laboratory on Chemicals Risk Control and Pollution Prevention Technology, Key Laboratory of Industrial Ecology and Environmental Engineering, School of Environmental Science and Technology, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

Abstract: The control and risk prevention of emerging pollutants is a major national demand, and the environmental exposure of the pollutants should be assessed. However, using environmental monitoring methods to evaluate large-scale regional pollution characteristics requires high cost, and it is difficult to reflect the environmental fate of the pollutants comprehensively and systematically. Environmental multimedia fate model can accurately describe the migration, transformation and environmental trend of the emerging pollutants, and it is an effective tool for environmental risk assessment of new pollutants. Compared with traditional environmental multimedia fate model, spatially environmental multimedia fate model has the advantages of high resolution, high precision, and it can exhibit the spatial difference of the pollutant distribution. The ocean is an important sink for the emerging pollutants, so it is imperative to construct an environmental multi-media model integrating land and sea. In this paper, the current spatially environmental multimedia fate models for environmental exposure assessment of the emerging pollutants are summarized, and the model construction methods, relevant parameters acquisition and future research prospects are reviewed.

Key words: emerging pollutants; spatially environmental multimedia fate models; environmental exposure

收稿日期:2024-02-10, 修订日期:2024-03-29

基金项目:国家自然科学基金项目(22106013)

作者简介:解怀君(1991-),男,河北唐山人,副教授,博士,主要研究方向为新污染物环境暴露评价技术, E-mail: huaijunxie@mail.dlut.edu.cn

新污染物一般指新近被发现或被关注、对生态环境或人体健康存在风险、尚未纳入管理或者现有管理措施不足以有效防控其风险的污染物,如持久性有机污染物、环境激素、抗生素与微塑料等。这类污染物具有严重危害性、来源广泛性、风险隐蔽性、环境持久性及治理复杂性等特点^[1-2]。化学品的生产和使用是新污染物的主要来源^[3],如杀虫剂、化妆品、护理产品、药品等,这些化学物质在生产、使用、加工、运输、处置等物质流通过程中,均有可能释放并进入环境。受大气沉降、地表径流等影响,许多新污染物最后汇集到海洋,威胁海洋生态健康。目前,我国海洋环境已检出有机磷阻燃剂、抗生素、全氟化合物等新污染物^[4-6]。

近年来,国家越来越重视新污染物治理工作。2021年,“十四五”规划提出“重视新污染物治理”。2022年5月,国务院办公厅印发《新污染物治理行动方案》,同年10月,党的二十大报告进一步要求“深入推进污染防治”“开展新污染物治理”^[7]。新污染物风险评估是对其进行治理的前提,而评估新污染物的风险首先需要考察其环境暴露水平。

近几十年来,痕量污染物的分析检测技术发展迅速,一些环境污染物的检出限可低至 ng/L 甚至 pg/L。非靶标筛查技术的发展可实现环境样品中新污染物高通量定性与识别。然而,仅靠环境样品采集和分析等实验手段研究新污染物环境暴露仍存在弊端。一方面,受限于化学物质标准品的可获取性,新污染物的全面准确定量难以实现;另一方面,仅靠个别点位的样品分析结果,难以全面反映区域新污染物污染特征,而高密度、多频次的样品采集耗费的人力、物力成本过高;另外,不同环境介质中新污染物同步前处理和分析技术难度大,仅利用环境监测手段,也难以反映污染物在环境中的迁移与转化过程。

基于排放/释放源处污染物的排放或释放速率(E , mol/s),结合污染物的物理化学性质、环境行为参数及自然环境的属性参数,可以构建环境数学模型(以下简称环境模型),用于预测污染物的环境浓度^[8]。环境模型有多种类型,其中多介质环境模型基于质量平衡原理,可描述污染物在

多介质环境系统中的输入与输出、在不同环境介质中的迁移转化及分布,从而揭示污染物环境行为和归趋的内在、本质规律性。传统的环境多介质模型,将环境系统简化为均质的相,假设各介质空间特性均匀,模型模拟出的结果难以体现污染物环境行为特征的空间差异性。近年来发展出具有空间分辨率、能对污染物在时间和空间上的多介质归趋进行模拟分析的空间分异多介质环境模型。

目前,覆盖我国大尺度区域,尤其是包括海洋环境的新污染物空间分异多介质环境模型相关研究还较少,在新污染物治理大背景下,亟须发展基于陆海统筹的多种类新污染物环境暴露预测模型,以辅助新污染物风险评估工作。基于此,本论文重点针对新污染物环境多介质空间分异模型研究进展、构建方法、发展前景进行综述。

1 环境多介质空间分异模型

1.1 模型介绍

环境多介质模型简化并模拟有机化学品的来源、迁移转化过程、归趋,目前应用最广泛的环境多介质模型是 Mackay 等创建的环境多介质逸度模型^[9]。该模型因具有所需参数少、结果表示直观、适用研究区域广泛、计算方法可推广到不同的环境介质等特点^[10-11],目前已被应用到全球以及许多地区解析污染物的环境归趋等研究。该模型可以在稳态和非稳态条件下进行构建,根据质量平衡方程的复杂程度,可分为 I、II、III、IV 4 个模型等级。I 级模型对应稳态、平衡、无流动的环境系统;II 级模型对应稳态、平衡、有流动的环境系统;III 级模型对应稳态、非平衡、有流动的环境系统;IV 级模型对应非稳态、非平衡、有流动的环境系统。

常规的多介质环境模型将环境系统简化为均质的环境相,假设各介质空间特性均匀,模型模拟出的结果难以体现污染物环境暴露的空间差异性^[12]。环境多介质空间分异模型是指具有空间分辨率、能对污染物在时间和空间上的多介质归趋进行模拟分析的一类模型^[13-14]。针对常规多介质环境模型空间辨识度较差等问题,可将研究区域划分为若干个子区域构建模型。通

过区域间大气和水的流动将子区域连接起来从而形成具有空间分布特征、能够进行空间迁移转化分析的环境多介质模型。相比于常规模型,具有空间分异特点的多介质模型有以下优点:首先,空间分异模型能够考虑到空间差异性,即不同地理区域的属性值可能会存在差异,从而更能反映地理空间环境暴露数据的真实情况;其次,其具有较高的精度,逸度模型可以通过对已有数据的拟合,预测未来污染物的空间分布情况,并且空间分异还有助于将预测结果与局部监测数据进行对比验证。

1.2 环境多介质空间分异模型构建方法与参数获取

1.2.1 模型构建现阶段存在问题

目前,由于Ⅲ级逸度模型可模拟网格间大气、淡水等环境相的相互流动过程,并且不用输入随时间变化的排放数据,大多数环境多介质空间分异模型均采用Ⅲ级模型框架。与常规环境多介质模型类似,环境多介质空间分异模型构建的基本步骤为:确定模型的基本框架、输入模型所需的参数、模型可靠性验证、不确定性和灵敏度分析等(图1)。在上述过程中,由于新污染物的监测数据和排放数据尚未充分积累,全国性的监测网络和排放清单亦未完善,而且并没有完整的针对新污染物的全国排放清单,这些限制因素给模型的开发和应用带来了一定挑战。在环境参数方面,获取构建环境多介质空间分异模型所

需的气象、水文和地理信息等基础环境信息面临一定的困难,这进一步限制了此类模型在我国的开发和应用。以下对获取环境多介质空间分异模型参数的方法进行简要介绍。

1.2.2 排放速率的获取

在实际构建环境多介质空间分异模型时,通常需要将排放速率分布到每个网格单元,而由于部分化学品的排放清单缺失,所以排放速率获取往往面临一定的困难。在具体操作时,往往采取排放因子法估算每个网格中的排放速率,具体包括按化学品生命周期估算以及按化学品使用行业估算两种方法。

(1)按照化学品生命周期估算排放速率

按照化学品生命周期估算主要是通过将化学品的生命周期划分为不同阶段,包括生产、运输、使用和废弃处理等。每个阶段都可能涉及不同的环境排放过程。在每个生命周期阶段,采用排放因子法进行估算,不同生命周期阶段的排放源和排放过程可能存在差异。最后,将各个生命周期阶段的排放量整合计算,得到化学品在其整个生命周期中的环境排放速率。

鄢世阳等^[15]在构建全国溴代阻燃剂(BFRs)环境多介质空间分异模型时,将其生命周期场景分为生产、加工、使用、火灾事故、垃圾填埋、垃圾焚烧、废水处理、倾倒与简易填埋8个过程。通过排放因子法计算BFRs在全生命周期不同阶段的环境排放量,同时基于排放量与GDP呈正相关关系,按照每个网格的GDP比值将BFRs的总排放量分配至各个网格单元中。

这种方法的优点是:在相同应用条件下将一类化学品的排放因子视为同一数值,使用简单,且适用于多种化学品和不同行业,具有一定的通用性。然而,这种方法的缺点也比较显著。由于对化学品的泛化处理,所以可能导致估算的排放速率的精度较低,特定情况下的准确性有限,在处理特定的化学品或行业时可能不够精确。此外,也无法有效考虑不同地区排放的差异性。

(2)按照化学品使用行业估算排放速率

按照化学品使用行业进行排放速率的估算是一种常见的方法。该方法基于相关行业的统计数据和排放因子,通过估算每个网格单元中的

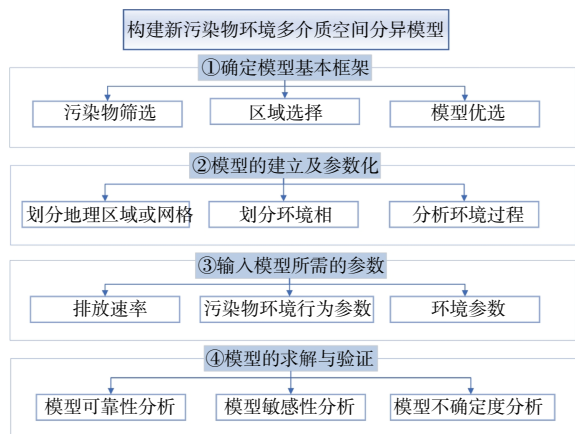


图1 环境多介质空间分异模型构建流程

Fig. 1 Flowchart of spatially environmental multimedia fate models construction

排放速率, 实现对环境多介质空间分异模型的构建。与按照化学品生命周期估算排放速率的方法相比, 其适用于各种规模和类型的排放源, 准确度也相对较高。

Liu 等^[16] 在建立渤海地区环境多介质空间分异模型时, 针对苯并芘(BaP)的排放, 将其排放源划分为点源和非点源。针对点源排放, 收集了研究区域内所有焦化企业和电解铝企业的产量和点位信息, 结合统计年鉴数据, 将产量分配至对应网格, 最后利用排放因子进行计算。对于非点源排放, 首先根据排放因子和省级排放活动数据计算出各类排放源的省级排放量。在此基础上将省级排放分解为县级排放, 然后将县级排放量进行重新整合, 估算出每种排放源的网格排放。

Shi 等^[17] 在构建海州湾多环芳烃的环境多介质模型时, 将多环芳烃的排放源分为 3 种, 分别为: 移动源(汽油车、柴油车、摩托车; 非道路移动源, 如铁路和船舶)、居民排放源(气体燃料和秸秆燃烧)和工业排放源(工业煤燃烧、金属冶炼、焦化和核燃料加工)。研究区域内机动车保有量、客货船保有量、居民天然气供给量、燃烧煤炭重量等数据均由相关统计年鉴获取, 并用排放因子计算得到 3 类排放源的排放量。Dai 等^[18] 在构建长江口抗生素的环境多介质模型时, 将抗生素分为人用抗生素和兽用抗生素。根据生产区域人均使用量和流域人口, 可得到流域范围的抗生素使用量, 其中人口统计主要由官方数据得到, 而兽用抗生素的排放量按养殖规模计算得到。

1.2.3 污染物理化性质参数与环境参数获取

理化性质参数包括对污染物分子的基本描述参数, 对于Ⅲ级环境多介质空间分异模型, 一般需要获取的理化性质参数为相对分子质量(M_r)、亨利定律常数(K_H)、蒸气压(P)、正辛醇/水分配系数(K_{OW})、空气/水分配系数(K_{AW})、正辛醇/空气分配系数(K_{OA})、水溶解度(S_W)、土壤(沉积物)吸附系数(K_{OC})和生物富集因子(BCF)等(表 1)。这些理化性质参数可查询环境手册或文献, 部分参数也可以通过模型预测获得。

环境属性参数主要用来描述环境系统的性质, 主要包括区域规模、环境相子相的体积分数、温度(气温、海水温度等)、环境相子相中有

表 1 构建环境多介质空间分异模型一般需要获取的参数汇总
Tab.1 Summary of parameters to be obtained in building spatially environmental multimedia fate models

需要获取参数名称	单位	需要获取参数名称	单位
摩尔质量	g/mol	$\log K_{OA}$	-
熔点	℃	空气中半减期	h
溶解度	g/m ³	淡(海)水沉积物中半减期	h
蒸气压	Pa	淡(海)水中半减期	h
亨利常数	-	植被中半减期	h
$\log K_{AW}$	-	土壤中半减期	h
$\log K_{OW}$	-	BCF	-

机碳分数、环境相密度、迁移速率、清除比例等。区域间的空气和水流动是污染物进行空间迁移的重要载体, 在一些环境多介质空间分异模型中, 还会引入流动矩阵的概念^[19], 流动矩阵可以将相邻网格间空气或水的平流迁移联系起来。流动矩阵构建的方法如下: 获取大气年平均流速, 将其与大气网格截面面积相乘估算得到气流流量; 同样, 将海水流速与海洋网格截面面积相乘估算得到海流流量, 最终结合入海流量进行水量平衡。

在环境多介质空间分异模型中, 环境参数分为空间差异参数与非空间差异参数。空间差异参数主要通过卫星监测数据获取, 如温度、植被覆盖度等。非空间差异参数主要是一些地理差异对参数的影响较小、获取较复杂或参数对模型结果的影响较小的参数, 如各环境相固体的有机碳分数、降雨清除比例等。环境参数在取用时可使用平均值或表示为时间的函数。

2 环境多介质空间分异模型研究进展

2.1 全球环境多介质空间分异模型

2.1.1 Globo-POP 模型

Globo-POP 模型是一个Ⅳ级(非平衡和非稳态)全球尺度逸度模型。该模型将全球环境划分为环绕地球的 10 个纬向气候带, 每个气候带由 6 个相互关联的环境区室组成: 大气、农业土壤、未耕土壤、淡水、淡水沉积物和表层海洋。除大气层外, 所有环境区室统称为“地面介质”^[20-22]。

Li 等^[23] 基于 Globo-POP 探究了在全球 1°×1° 的分辨率下, 2000—2012 年三氯杀螨醇的环境归

趋,评估了其远距离迁移能力,发现三氯杀螨醇在北极的污染潜力比前人研究过的其他污染物更高。

2.1.2 BETR-Global 模型、BETR-World 模型

Berkeley-Trent-Global (BETR-Global) 模型根据地理特征、政治范围、化学品使用模式或一般网格将研究区域划分为若干个较小的部分。其适用于较大空间异质性区域,使用逸度概念描述空气和水流在各个区域的化学归趋和运输行为,该模型适用范围较为广泛,可以用于地区、洲际乃至全球^[19]。

BETR-Global 模型将全球划分为 288 个区域,MacLeod 等曾使用 BETR-Global 模型模拟了 PCBs 同系物 70 年间的全球环境归趋^[24]。Berkeley-Trent-World (BETR-World) 模型将地球划分为 25 个区域,每个区域划分为上层大气相、下层大气相、植被相、土壤相、淡水相、海水相以及淡水沉积物相 7 个环境相。Toose 等曾使用 BETR-World 模型研究了六氯环己烷的长距离迁移过程,并估算了六氯环己烷的全球归趋^[25]。

2.2 区域环境多介质空间分异模型

2.2.1 BETR-North America 模型、EVn-BETR 模型

Berkeley-Trent North American (BETR-North America) 将北美地区按照地理区域划分为 24 个区域,将整个环境系统分为 7 种介质,分别为上层大气、下层大气、淡水、淡水沉积物、土壤、海水和植被^[19]。2002 年,MacLeod 等基于 BETR-North America 模型模拟了北美地区毒杀芬的环境归趋,计算了毒杀芬在各种环境介质中的残留情况^[26]。European Variant Berkeley Trent (EVn-BETR) 模型是将欧洲大陆通过 $5^{\circ} \times 5^{\circ}$ 的网格划分为 50 个区域^[27-29]。BETR-North America 与 EVn-BETR 模型由于环境相数量较多,模拟计算时需要输入大量的环境参数,使得模型输出结果的不确定性较大,在应用时需开展不确定性分析。此外,BETR 模型通常将污染物在大气、淡水和海水的转移与气象数据、水文地理数据库和地理信息系统技术联系起来,用来分析模型的不确定性和敏感度^[30]。

2.2.2 SimpleBox 模型

SimpleBox 模型是一个嵌套的多介质环境模

型,SimpleBox 的开发工作始于 1982 年,当时最早的版本是针对“一级和二级”模型开发的。1996 年,可以进行非平衡稳态计算(三级)和非平衡非稳态(四级)模型计算^[31-32]。SimpleBox 克服了传统逸度模型假设环境均质性带来的缺陷,引入了“嵌套”的概念。在嵌套模型中,小规模模型的输入和输出与区域性模型相联系,而区域性模型又与洲际模型或更大规模模型相联系。

与最初的 SimpleBox 1.0 模型相比,SimpleBox 2.0 进行了一些修正。增加了更多的环境区室,并将区域尺度嵌套到全球尺度。在 SimpleBox 2.0 中,环境区室包括空气、淡水、海水、沉积物以及 3 个独立的土壤相和 2 个植被相^[33]。当在不同尺度上进行模拟时,可以适当调整环境区室的数量。

SimpleBox 3.0 由 4 个空间尺度组成:地方、区域、大陆和全球尺度。区域和大陆尺度由大气、淡水、海水、淡水沉积物、海水沉积物、农业土壤、自然土壤、工业土壤、自然土壤上的植被以及农业土壤上的植被 10 个环境区室组成^[34]。Hauck 等^[35]使用 SimpleBox 3.0 估算了欧洲空气、土壤和淡水中 BaP 浓度,通过蒙特卡罗分析,给出模型的关键参数和不确定性信息,结果表明在空气和水中对 BaP 浓度影响较为明显的参数为污染物的排放量。

目前,SimpleBox 模型已经开发到 4.0 版本。与 SimpleBox 3.0 相比,新模型嵌入由北极、温带和热带气候带组成的北半球环境。区域和大陆尺度中的环境区室,包括大气、淡水、海水、淡水沉积物、海水沉积物、自然土壤、农业土壤和其他土壤。全球尺度分为中温带、北极区和热带,包含空气、海水、海水沉积物和土壤等环境相^[36],SimpleBox 4.0 还增加了湖泊相、深海相,考虑了海洋环流、间歇性降雨等影响。Wang 等^[37]使用 SimpleBox 4.0 模型评估了来自欧洲和北美大陆的持久性有机污染物排放对北极环境的影响。

2.2.3 Impact 2002 模型

Impact 2002 模型将西欧地区分为 136 个流域单元和 156 个空气单元,包括空气相、土壤相、植被相、水相和沉积物相。Margni 等^[38]基于 Impact 2002 模型对西欧地区二噁英同系物的环境暴露开展评估,并进一步探究了其暴露风

险。Pennington 等^[39]使用 Impact 2002 模型评估了 2,3,4,7,8-五氯二苯并呋喃 (PeCDF) 在西欧的环境浓度分布、相关食品中的污染物水平,并对污染物被人体摄取的比例进行了计算。另外,该研究还将 Impact 2002 模型计算结果与普通模型计算结果进行比较,用以探讨污染物环境多介质模型构建过程中空间分辨率的重要性。

2.2.4 G-CIEMS 模型

Grid-Catchment Integrated Environmental Modeling System (G-CIEMS) 是基于地理信息系统 (GIS) 开发的一个具备空间分辨和地理信息属性的动态多介质环境归趋模型。空气相由上、下两层相互连接的网格单元组成,分别模拟地表空气和高空空气。海水相基于地理特性分割为多边形几何形状。土壤相、森林相等陆地部分根据陆地流域划分。Suzuki 等^[40]将日本划分为 $5\text{ km} \times 5\text{ km}$ 分辨率的空气网格单元和平均面积为 9.3 km^2 的流域区域,对应约 4 万个空气网格单元和 3.8 万个河流流域多边形,对二噁英、苯、1,3-丁二烯和邻苯二甲酸二辛酯在日本境内的迁移转化进行了研究。G-CIEMS 模型目前还被用于模拟放射性物质扩散对河流的影响。

2.3 应用于我国的环境多介质空间分异模型

20 余年来,学者们已经将环境多介质空间分异模型应用于我国全境或部分区域,如鄢世阳等^[15]基于我国的区域环境属性,建立了 $50\text{ km} \times 50\text{ km}$ 分辨率的空间分异三级多介质环境逸度模型。以阻燃剂十溴二苯醚 (BDE-209) 为例,模拟和预测了 BDE-209 在我国的大气、水体、土壤、沉积物中的分布。计算值与前人文献报道的部分区域各环境相中 BDE-209 的实验测试浓度进行对比,预测结果与实测值吻合。Zhu 等^[41]使用 Sino Evaluative Simplebox-MAMI Model (SESAMe) v3.0 预测了中国环境中 BaP 的浓度。与 SESAMe 相比,新版本中增加了海水相,并考虑了温度对降解速率的影响以及农业土壤灌溉对化学物质运输过程的影响。分辨率为 $50\text{ km} \times 50\text{ km}$ 的网格单元中有空气、淡水和沉积物、海水和沉积物、自然土壤、农业土壤、城市土壤、自然植被、农业植被等环境相,每个网格单元输入 65 个环境参数。2016 年,考虑到淡水 pH 的空间变化,SESAMe 3.0 版本更新为

SESAMe 3.3 版本^[42]。

曹红英等^[43]在稳态条件下研究了菲在天津市的多介质分布和相间迁移,模型包括气、水、土和沉积物 4 个主相,并将气、土两相以 $2\text{ km} \times 2\text{ km}$ 的分辨率划分为 3113 个网格。模型计算结果表明,土壤和沉积物是该地区菲的主要汇,特别是菲在沉积物中积累了总量的 70% 以上。大气菲的空间分布格局基本服从其排放特征,而土壤有机质含量对菲降解速率的影响决定了其在土壤中的分布。Liu 等^[44]采用 $1^\circ \times 1^\circ$ 网格将环渤海地区划分为 56 个区域,使用 BETR 模型模拟沿海地区 PFOS 的迁移转化过程,将研究区域划分为空气、植被、淡水、沉积物、土壤和海水 6 个相互连接的区域。56 个区域通过相邻段之间的空气、淡水和海水的平流连接。近年来,由于发现城市和农村的环境参数以及排放量存在差异, Song 等^[45]基于 BETR 模型开发出了 BETR-Urban-Rural 模型,空气相和土壤相区分为城市空气相和农村空气相、城市土壤相和农村土壤相,并以环渤海地区为例,估算了多环芳烃 (PAH) 的浓度和归趋。各环境多介质空间分异模型汇总见表 2。

3 环境多介质空间分异模型应用前景与展望

环境多介质空间分异模型可以模拟新污染物在陆地和海洋环境中的分布和浓度变化,帮助研究人员更好地理解新污染物的环境行为特征。对于风险评估部门,可以有效地评估其对环境和人类健康的潜在风险、完成化学物质环境风险筛查,并有助于制定相应的环境保护措施。值得注意的是,随着模型结构越来越复杂,环境区室越来越多,模型分辨率越来越高,模型需要输入的各类参数也越来越多。对于种类众多的新污染物而言,许多参数难以获取,基于环境大数据和机器学习构建预测模型,或许是实现多介质模型参数获取的有效手段。

目前,环境多介质空间分异模型的建立与求解,最大的障碍可能在于污染物排放数据或监测数据的缺失。因此,完善新污染物排放的基础信息库势在必行。需要建立新污染物全国性或区域性的网格化排放清单,并对这些污染物排放监测数据公开,以便为新污染物的迁移与扩散模

表 2 几种常见的环境多介质空间分异模型

Tab.2 Several common spatially environmental multimedia fate models

研究区域	模型名称	空间划分方法	环境相划分	污染物类型	模型应用情况	参考文献
全球	Globo-POP	将全球划分为10个纬度带	大气、淡水、淡水沉积物、表层海水、农业土壤、自然土壤	持久性有机污染物	Dicofol、PCBs、PeCB等	[20-23,46-47]
	BETR-Global	按15°×15°的网格划分	上层大气、下层大气、淡水、淡水沉积物、土壤、海水和植被	持久性有机污染物	PCBs、VMS等	[24,48]
	BETR-World	按地理区域划分为25个区域	上层大气、下层大气、植被、土壤、淡水、海水以及淡水沉积物	持久性有机污染物	α -HCH等	[25]
北美	BETR-North America	按地理区域划分为24个区域	上层大气、下层大气、淡水、淡水沉积物、土壤、海水和植被	持久性有机污染物	Toxaphene等	[26]
欧洲	EVn-BETR	按5°×5°的网格划分	上层大气、下层大气、淡水、淡水沉积物、土壤、海水和植被	持久性有机污染物	BDE-209、 α -HCH、PBDEs等	[27-29]
欧洲、北美等	SimpleBox	嵌套式多介质归趋模型	大气、淡水和海水、淡水和海水沉积物、自然土壤、农业土壤和其他土壤	持久性有机污染物	BaP等	[35]
西欧	Impact 2002	大气基于网格单元划分、陆地基于流域划分	空气、水、土壤、沉积物、植被	持久性有机污染物	TCDD、PeCDF等	[38-39]
日本	G-CIEMS	大气基于网格单元划分、陆地基于流域划分、海洋基于多边形划分	上层大气、下层大气、淡水、河湖沉积物、土壤、植被、海水、海水沉积物	持久性有机污染物	TCDD、苯、1,3-丁二烯、邻苯二甲酸二辛酯等	[40]
中国渤海区域	BETR-Urban-Rural	按1°×1°的网格划分	上层大气、农村大气、城市大气、植被、农村土壤、城市土壤、淡水、海水、淡水沉积物	持久性有机污染物	PAHs	[45]
中国	SESAMe	按50 km×50 km的网格划分	空气、淡水、沉积物、3种土壤(自然土壤、农业土壤、城市土壤)和2种植被(自然植被、农业植被)	持久性有机污染物、中性和可电离分子	BaP等	[41]

型研究提供数据支持。环境学科是一门交叉学科,基础的环境模型需要依靠计算机语言来求解,而各种多介质环境模型更是与地理信息系统、动力学模型息息相关。未来可以进一步开发出地理信息系统与空间分异的环境多介质模型相结合的平台,供监管人员了解新污染物在环境中的环境暴露与归趋,以便更好地对其进行控制和管理。

参考文献:

- [1] 刘 沛,黄慧敏,余 涛,等.我国新污染物污染现状、问题及治理对策[J].环境监控与预警,2022,14(5): 27-30,70.
- [2] 王 蕾,邢维龙,范德玲,等.新污染物治理面临的技术挑战与科技支撑建议[J].环境影响评价,2023,45(2): 1-6.
- [3] LA FARRÉ M, PÉREZ S, KANTIANI L, et al. Fate and toxicity of emerging pollutants, their metabolites and transformation products in the aquatic environment[J]. TRAC Trends in Analytical Chemistry, 2008, 27(11): 991-1007.
- [4] 刘 珂.胶州湾典型海岸带沉积物中喹诺酮抗生素时空分布特征及风险评价[D].青岛:青岛大学,2018.
- [5] 刘宝林,张 鸿,谢刘伟,等.深圳近岸海域全氟化合物的污染特征[J].环境科学,2015,36(6): 2028-2037.
- [6] ZHONG M Y, TANG J H, MI L J, et al. Occurrence and spatial distribution of organophosphorus flame retardants and plasticizers in the Bohai and Yellow Seas, China[J]. Marine Pollution Bulletin, 2017, 121(1/2): 331-338.
- [7] 单菁菁.探索构建中国特色新污染物防控治理体系[J].人民论坛,2023(4): 58-61.
- [8] MACLEOD M, SCHERINGER M, MCKONE T E, et al. The state of multimedia mass-balance modeling in environmental science and decision-making: are multimedia models dinosaurs in the modern world?[J]. Environmental Science & Technology, 2010, 44(22): 8360-8364.
- [9] MACKAY D, PATERSON S. Fugacity revisited: Donald Mackay and Sally Paterson[J]. Environmental Science & Technology, 1982, 16(12): 654A-660A.
- [10] 许晶晶,张圣虎,刘济宁,等.逸度模型在化学品暴露预测中的应用与展望[J].环境科学与技术,2014,37(11): 94-98.
- [11] 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.
- [12] 贺莹莹,李雪花,陈景文.多介质环境模型在化学品暴露评估中的应用与展望[J].科学通报,2014,59(32): 3130-3143.
- [13] 刘世杰,吕永龙,史雅娟.持久性有机污染物环境多介质空间分异模型研究进展[J].生态毒理学报,2011,6(2): 129-137.
- [14] HEIJUNGS R. Spatial differentiation, GIS-based regionalization, hyperregionalization, and the boundaries of LCA[M]// IOPPOLO G. Environment and Energy. Milano, Italy: FrancoAngeli, 2012: 165-176.
- [15] 鄢世阳,王中钰,陈景文,等.反映我国空间分异特性的多介质环境逸度模型的构建及十溴二苯醚的归趋模拟[J].生态毒理学报,2021,16(2): 127-139.
- [16] LIU S J, LU Y L, WANG T Y, et al. Using gridded multimedia model to simulate spatial fate of Benzo[a]pyrene on regional scale[J]. Environment International, 2014, 63: 53-63.
- [17] SHI W T, LIU Q, CAO J C, et al. Analysis of the multi-media environmental behavior of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) within Haizhou Bay using a fugacity model[J]. Marine Pollution Bulletin, 2023, 187: 114603.
- [18] DAI C M, HAN Y M, LI Y, et al. Simulation and risk assessment of typical antibiotics in the multi-media environment of the Yangtze River Estuary under tidal effect[J]. Environmental Science and Pollution Research, 2022, 29(54): 81875-81891.
- [19] 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, 2001, 8(3): 156-163.
- [20] WANIA F, MACKAY D. Modelling the global distribution of toxaphene: a discussion of feasibility and desirability[J]. Chemosphere, 1993, 27(10): 2079-2094.
- [21] WANIA F, MACKAY D. A global distribution model for persistent organic chemicals[J]. Science of the Total Environment, 1995, 160-161: 211-232.
- [22] WANIA F, DUGANI C B. Assessing the long-range transport potential of polybrominated diphenyl ethers: a comparison of four multimedia models[J]. Environmental Toxicology and Chemistry, 2003, 22(6): 1252-1261.
- [23] LI L, LIU J G, HU J X. Global inventory, long-range transport and environmental distribution of dicofol[J]. Environmental Science & Technology, 2015, 49(1): 212-222.
- [24] MACLEOD M, RILEY W J, MCKONE T E. Assessing the influence of climate variability on atmospheric concentrations of polychlorinated biphenyls using a global-scale mass balance model (BETR-Global)[J]. Environmental Science & Technology, 2005, 39(17): 6749-6756.
- [25] 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.
- [26] 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.

- [27] EARNSHAW M R, JONES K C, SWEETMAN A J. A first European scale multimedia fate modelling of BDE-209 from 1970 to 2020[J]. *Environment International*, 2015, 74: 71-81.
- [28] HANSEN K M, PREVEDOUROS K, SWEETMAN A J, et al. A process-oriented inter-comparison of a box model and an atmospheric chemistry transport model: insights into model structure using α -HCH as the modelled substance[J]. *Atmospheric Environment*, 2006, 40(12): 2089-2104.
- [29] PREVEDOUROS K, JONES K C, SWEETMAN A J. European-scale modeling of concentrations and distribution of polybrominated diphenyl ethers in the pentabromodiphenyl ether product[J]. *Environmental Science & Technology*, 2004, 38(22): 5993-6001.
- [30] 刘丹, 张圣虎, 刘济宁, 等. 化学品多介质逸度模型软件研究进展[J]. *环境化学*, 2014, 33(6): 891-900.
- [31] BRANDES L J, DEN HOLLANDER H, WAN DE MEENT D. SimpleBox 2.0: a nested multimedia fate model for evaluating the environmental fate of chemicals[R]. Bilthoven, The Netherlands: National Institute of Public Health and the Environment, 1996.
- [32] SU C, ZHANG H, CRIDGE C, et al. A review of multimedia transport and fate models for chemicals: principles, features and applicability[J]. *Science of the Total Environment*, 2019, 668: 881-892.
- [33] KLOPFFER W, SCHMIDT E. Comparative determination of the persistence of semivolatile organic compounds (SOC) using SimpleBox 2.0 and chemrange 1.0/2.1[J]. *Fresenius Environmental Bulletin*, 2003, 12(6): 490-496.
- [34] HOLLANDER A, HESSELS L, DE VOOGT P, et al. Implementation of depth-dependent soil concentrations in multimedia mass balance models[J]. *SAR and QSAR in Environmental Research*, 2004, 15(5/6): 457-468.
- [35] HAUCK M, HUIJBREGTS M A J, ARMITAGE J M, et al. Model and input uncertainty in multi-media fate modeling: Benzo[a]pyrene concentrations in Europe[J]. *Chemosphere*, 2008, 72(6): 959-967.
- [36] HOLLANDER A, SCHOORL M, VAN DE MEENT D. SimpleBox 4.0: improving the model while keeping it simple[J]. *Chemosphere*, 2016, 148: 99-107.
- [37] 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.
- [38] MARGNI M, PENNINGTON D W, AMMAN C, et al. Evaluating multimedia/multipathway model intake fraction estimates using POP emission and monitoring data[J]. *Environmental Pollution*, 2004, 128(1/2): 263-277.
- [39] PENNINGTON D W, MARGNI M, AMMANN C, et al. Multimedia fate and human intake modeling: spatial versus non-spatial insights for chemical emissions in Western Europe[J]. *Environmental Science & Technology*, 2005, 39(4): 1119-1128.
- [40] 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.
- [41] ZHU Y, TAO S, PRICE O R, et al. Environmental distributions of benzo[a]pyrene in China: current and future emission reduction scenarios explored using a spatially explicit multimedia fate model[J]. *Environmental Science & Technology*, 2015, 49(23): 13868-13877.
- [42] ZHU Y, PRICE O R, KILGALLON J, et al. A multimedia fate model to support chemical management in China: a case study for selected trace organics[J]. *Environmental Science & Technology*, 2016, 50(13): 7001-7009.
- [43] 曹红英, 陶澍, 王喜龙, 等. 天津地区菲的空间分异多介质归趋模型[J]. *环境科学*, 2003, 4(5): 54-59.
- [44] LIU S J, LU Y L, XIE S W, et al. Exploring the fate, transport and risk of Perfluorooctane Sulfonate (PFOS) in a coastal region of China using a multimedia model[J]. *Environment International*, 2015, 85: 15-26.
- [45] 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.
- [46] WANIA F, DALY G L. Estimating the contribution of degradation in air and deposition to the deep sea to the global loss of PCBs[J]. *Atmospheric Environment*, 2002, 36(36/37): 5581-5593.
- [47] BAILEY R E, VAN WIJK D, THOMAS P C. Sources and prevalence of pentachlorobenzene in the environment[J]. *Chemosphere*, 2009, 75(5): 555-564.
- [48] GENUALDI S, HARNER T, CHENG Y, et al. Global distribution of linear and cyclic volatile methyl siloxanes in air[J]. *Environmental Science & Technology*, 2011, 45(8): 3349-3354.

(本文编辑: 胡莹莹)