顾璐瑶,周 蓉,李思敏,等.典型场景下新污染物暴露评估模型的研究基础与开发路径 [J]. 中国环境科学, 2026,46(2):972-988.
Gu L Y, Zhou R, Li S M, et al. Foundational research and development pathways of exposure assessment models for emerging pollutants under representative scenarios [J]. China Environmental Science, 2026,46(2):972-988.

典型场景下新污染物暴露评估模型的研究基础与开发路径

顾璐瑶[1],周 蓉[1],李思敏[1],穆洪新[1],卜元卿[1,2,3*] (1.生态环境部南京环境科学研究所,固体废物污染防治研究中心,江苏 南京 210042；2.华东区域危险废物环境风险防控技术中心,江苏 南京 210042；3.南京信息工程大学江苏省大气环境与装备技术协同创新中心,江苏 南京 210004)

摘要：随着新污染物在典型工业场地中的频繁检出,其在土壤-地下水系统中的迁移与暴露问题日益引发关注.聚焦我国暴露评估模型本土化构建的现实需求,结合当前污染场地管理与模拟实践,识别了建模工作中在数据获取、参数适用性与方法集成方面存在的关键障碍.系统梳理了国内外非饱和带与饱和带污染物迁移模型,比较其在过程表达、空间尺度和模型耦合方面的适用边界,并探讨了模型集成与建模智能化的发展趋势,特别是在融合物理机制与数据驱动方法方面所展现的潜在价值.针对我国典型地质与污染特征,进一步提出推进暴露评估模型发展的技术路径,强调应通过情境构建的标准化、参数数据库的本土化与评估平台的一体化集成,提升模型的科学性与实用性,为新污染物环境暴露模拟与健康风险管理体系的构建提供支撑.

关键词：新污染物；暴露评估模型；土壤-地下水系统
中图分类号：X821 **文献标识码**：A **文章编号**：1000-6923(2026)02-0972-18

Foundational research and development pathways of exposure assessment models for emerging pollutants under representative scenarios. GU Lu-yao[1], ZHOU Rong[1], LI Si-min[1], MU Hong-xin[1], BU Yuan-qing[1,2,3*] (1.Research Center of Solid Waste Pollution and Prevention, Nanjing Institute of Environmental Science, Ministry of Ecology and Environment, Nanjing 210042, China；2.East China Regional Technology Center of Hazardous Waste Environmental Risk Prevention and Control, Nanjing 210042, China；3.Jiangsu Collaborative Innovation Center of Atmospheric Environment and Equipment Technology, Nanjing University of Information Science & Technology, Nanjing 210004, China). *China Environmental Science*, 2026,46(2)：972~988

Abstract：With the frequent detection of emerging pollutants (EPs) at typical industrial sites, increasing attention has been directed toward their migration and exposure behaviors within soil-groundwater systems. This study focuses on the urgent need for localized construction of exposure assessment models in China. Drawing upon current practices in site management and simulation, it identifies key obstacles in data acquisition, parameter applicability, and methodological integration. On this basis, the paper systematically reviews existing contaminant transport models in both unsaturated and saturated zones, comparing their applicability with respect to process representation, spatial scale, and coupling capacity. It further explores recent trends in model integration and intelligent development, particularly the potential value of combining physics-based mechanisms with data-driven approaches. In light of China's complex geological and contamination conditions, the study proposes a technical pathway for advancing exposure model development. It emphasizes the importance of standardized scenario construction, localization of environmental parameter databases, and integrated platform development, aiming to enhance both the scientific robustness and practical applicability of exposure simulations and to support the establishment of a risk management framework for emerging pollutants.

Key words：emerging pollutants；exposure assessment models；soil-groundwater system

随着我国城市化与工业化的持续推进,持久性有机污染物(POPs)、内分泌干扰物(EDCs)、抗生素等新污染物在土壤和地下水等介质中频繁检出,尤其在化学农药制造、原料药生产、染料合成和有机氟化工等重点行业场地,其迁移与积累问题日益突出,对饮用水源安全、地下生态系统稳定及公众健康构成长远风险[1].调查显示,氟化工厂地下水中全氟和多氟烷基物质(PFAS)总浓度可达 10^2~10^4ng/L[2];制药厂周边土壤中累计检出多类抗生素,总量可达数百 ng/g[3];部分农药厂遗留地中有机氯农药残留亦可达到 mg/kg 水平.工业场地新污染物在土壤-地下水系统中的暴露风险已不容忽视[4].近年来,中国新污染物治理的政策体系逐步完善.2020 年《“十四

收稿日期：2025-07-07
基金项目：国家重点研发计划课题(2023YFC3706603)
* 责任作者, 研究员, byq@nies.org

五”规划建议》首次提出“重视新污染物治理”;2022 年《新污染物治理行动方案》系统确立“筛选—评估—管控”的总体路径;2023 年《重点管控新污染物清单》明确 14 类重点管控对象[5];2025 年《关于加强重点行业新污染物建设项目环境影响评价工作的意见》则将新污染物纳入环评制度,重点覆盖石化、涂料、纺织印染、橡胶、农药和医药等行业建设项目[6].在此背景下,加强典型工业场地新污染物的环境暴露研究与风险评估模型开发,已成为保障生态环境安全和公众健康的关键技术需求.

当前,新污染物暴露识别与环境归趋模拟仍面临挑战.一方面,污染场地中污染源多元、污染介质复杂,土壤-地下水系统具有高度空间异质性与动态性,导致污染物迁移路径具有高度不确定性[7]另一方面,新污染物在非饱和带-饱和带交界面区域的传输行为、相态转化及归趋机制尚缺乏系统研究,严重制约了暴露过程建模的科学性与评估结果的解释力[8].目前,尽管 MODFLOW、MT3D、HYDRUS、FEFLOW 等数值模型已广泛应用于地下水流动与溶质迁移模拟,在理论方法和技术路径方面形成了一定基础[9],但多数研究仍聚焦于单一介质或单过程模拟,缺乏对土壤-地下水系统一体化建模的系统性探索,特别是在我国复杂水文地质背景和特定工业污染情景下,模型的本土适应性和参数化体系尚不完善.

基于上述背景,本文聚焦典型场地中新污染物在土壤-地下水系统中的迁移与暴露机制,系统梳理国内外现有非饱和带与饱和带污染物迁移模型,比较分析主流模型的功能特征与耦合潜力,重点讨论当前我国在暴露评估模型构建过程中面临的适用性不足、参数缺失和模型解释能力有限等问题.在此基础上,进一步提出适用于本土典型场景的模型优化方向与平台集成策略,旨在为中国新污染物识别与暴露评估技术体系的构建提供理论支撑与方法.

1　我国场地新污染物暴露模型构建面临的问题

在“十四五”新污染物治理行动的推动下,构建适用于我国典型场地特征的新污染物暴露评估模型,已成为国家生态环境管理的重要技术需求.然而,当前我国在数据获取、模型适配及政策对接等方面仍面临多重挑战,严重制约了新污染物暴露模型的本土化构建与工程化应用.

1.1　场地数据获取难度大

我国多数工业污染场地存在历史资料缺失、环境档案不完整等问题,导致暴露评估所需的关键输入参数缺乏可靠的本土依据.同时,地下介质(如土壤与地下水)相关参数的采集成本高、技术门槛大,进一步加剧了数据缺失问题.尽管 MODFLOW、HYDRUS、FEFLOW 等高精度模型在国际上已广泛应用,但其对水文地质参数、长期监测数据等的依赖性极强,而我国多数污染场地尚难以满足模型运行所需的基础数据条件.尤其在地下水系统中,污染迁移过程具有高度隐蔽性与滞后性,污染物往往在无明显表征的情况下完成从源项向暴露受体的迁移过程.虽然我国已初步建立土壤污染监测体系,但监测指标覆盖面有限、采样与分析质量控制体系尚不完善,这些因素共同造成模型输入数据的严重匮乏,影响暴露模拟结果的可靠性与决策支撑效力.

1.2　新污染物基础数据积累不足

新污染物涵盖持久性有机污染物(POPs)、内分泌干扰物(EDCs)、抗生素、微塑料等多个类别,其理化性质、环境行为和生态毒性差异显著.然而,我国在相关基础参数积累方面尚处于起步阶段,暴露评估所依赖的关键理化常数、生物富集因子、毒性参数等多源于国外数据库,难以准确反映我国本土典型场地环境条件与暴露受体特征.目前尚未建立系统的新污染物暴露参数数据库,相关暴露因子与剂量-反应关系的本土化研究薄弱,导致新污染物暴露剂量估算误差大、健康风险评价结果偏差大,从而削弱了模型在风险识别与政策评估中的应用价值.

1.3　政策体系与模型适配度不足

中国污染场地环境管理的政策体系近年来虽逐步完善,但在新污染物风险评估方面仍存在明显滞后.目前已有多项关于场地调查、监测、健康风险评估的技术指南发布,但各类标准之间的衔接性与集成度不高,尚未形成统一高效的模型支撑体系.长期以来,风险评估实践中存在“重土壤、轻地下水”的倾向,造成地下水风险信息统计不足、介质间耦合建模薄弱.此外,部分评估工作仍沿用国外模型算法(如 ASTM 方法),其默认参数与我国实际地质、水文条件及政策指标体系存在显著差异,导致模型输出难以直接服务于本土管理决策[10].因此,亟需建立针对新污染物的暴露评估技术规范体系,推动模型方

法的本土化发展与政策协同,为我国生态环境风险管理提供坚实的技术支撑.

2 国内外典型模型综述与比较分析

目前,国内外已发展出多种污染物迁移过程模型,涵盖非饱和带土壤和地下水饱和含水层等不同介质环境,能够从多维度模拟污染物在多相介质中的运移机制及反应过程[11].为明确模型构建所需的过程边界与介质划分,图 1 对典型工业场地中新污染物在土壤–地下水系统中的主要迁移路径、关键作用机制及暴露通道进行了系统归纳,形成了“污染(源)——暴露途(径)—受体(汇)”全过程认知框架.在此基础上,本文将依据模型所适用的介质范围与模拟功能,对模型适用介质类型及所模拟的主控过程,对典型非饱和带与饱和带污染物迁移模型进行系统梳理与对比分析(表 1).

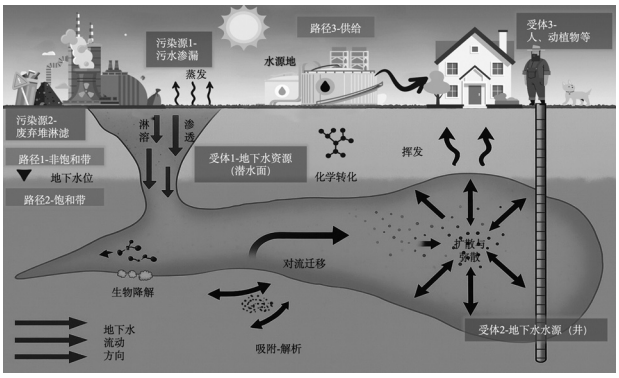


图 1 场地新污染物土壤–地下水系统迁移路径示意

Fig.1 Schematic diagram of the migration pathways of emerging pollutants in the soil–groundwater system

2.1 非饱和带污染物迁移模型

非饱和带(亦称包气带或通气带)位于地表与地下水之间,是污染物从源头进入地下含水层的关键过渡区域[12].其主要过程包括水文过程(如入渗、蒸散、土壤水分再分布)与地球化学过程(如吸附–解吸、氧化还原、微生物降解),对新污染物的垂向迁移路径和归趋行为具有重要影响[13].因此,准确模拟非饱和带中水流与溶质迁移过程,是开展污染物暴露评估与“源–汇”过程分析的基础.

非饱和带水流建模主要依赖 Richards 方程,结合对流–弥散–反应(ADR)方程描述溶质迁移过程.早期模型开发集中在以色列和荷兰,代表模型包括 UNSAT、UNSAT2 和 SWMII[14-16],这些模型为非稳态水分运动的模拟奠定了理论基础.目前,HYDRUS 系列模型已成为非饱和带建模的主流工具.HYDRUS-1D[17]与 HYDRUS-2D[18]分别适用于一维与二维情景[19],采用有限元法求解水流与溶质运移方程,并可扩展至三维情景,支持多组分溶质、胶体、病毒与微生物等复杂污染场景的模拟[17].其他模拟非饱和带水流和溶质迁移的模型包括 TOUGH[20]、SWAP[21]、VS2DI[22]和 MODFLOW- SURFACT[23]等.TOUGH 模型家族被广泛应用于多相、多组分、非等温系统的污染物迁移模拟.例如, TOUGH2 适用于非等温两相系统,T2VOC 可模拟非等温三相系统中的 VOCs 迁移,TMVOC 专用于多组分烃类混合物的行为建模.该系列模型在介质非均质性、气相行为及地热耦合模拟方面表现突出,适用于复杂边界条件下污染物跨相态迁移的评估[20]. SWAP 模型则强调土壤-植被-大气系统(SPAC)间的耦合过程,广泛用于农田管理及农药迁移模拟,支持水分、热量、溶质的联合作用及作物生长、根系吸水与营养盐循环过程的建模[21].VS2DI 模型由美国地质调查局(USGS)开发,采用有限差分法求解 Richards 和 ADR 方程,操作简便、计算效率高,适合教学和工程初步评估,仅支持单相流与单组分迁移,不适于复杂反应组分或多相态模拟[22]. MODFLOW-SURFACT 模型则基于 MODFLOW 扩展,支持非饱和带中多复杂程度的水流与污染迁移过程,适用于非饱和区与地下水系统的一体化建模,是实际工程应用中较为成熟的工具之一[23].

在中国,这些模型已得到不同程度的实践验证.其中,HYDRUS 系列的应用最为广泛.例如,有研究利用 HYDRUS-1D 模拟北京某再生污水灌溉系统中 PPCPs(药品和个人护理品)的迁移与降解过程,并结合 EPI Suite 软件基于分子结构参数确定降解系数,从而较好再现了 PPCPs 在非饱和带中的浓度分布与时空演化特征[24].张步迪等[25]、张惠等[26]则结合室内土柱试验,利用 HYDRUS 分析抗生素磺胺嘧啶在农田土壤中的运移规律,结果表明土壤有机质、pH 值与阳离子交换量对其迁移过程具有显著控制作用,但多数研究未能充分考虑污染物在土壤中的降解与转化机制[27].在工业污染场地中, HYDRUS-2D/3D 也被用于模拟苯系物等有机污染物的垂向迁

移与累积风险,结果揭示了污染物浓度随深度和时间的演化规律,但同时显示在复杂地质结构条件下模型对参数高度敏感[28].除 HYDRUS 外,SWAP 模型在我国农田氮肥和农药迁移研究中被广泛采用,并逐渐形成了“实测-率定-验证-情景预测”的应用路径[29].在此基础上,国内学者进一步发展了 China-PEARL 框架,通过引入本土化土壤-气候-作物参数集和标准场景,增强了农田场景下农药暴露风险模拟的适用性[30].与此同时,TOUGH 模型也已在部分石化场地 VOCs 泄漏模拟中得到应用,能够表征污染物跨相态转化过程,但对相对渗透率、毛细压和气液分配系数等输入参数高度敏感,率定工作往往依赖大量实验与长期监测数据[31].

总体而言,非饱和带模型是揭示污染物由地表向含水层迁移过程的核心工具,是地下水暴露建模的重要前置环节.值得注意的是,非饱和带介质结构复杂、空间异质性强,污染物迁移常涉及多相、多过程耦合,其模拟结果对初始含水状态、土壤水力学参数及污染物理化性质具有高度敏感性.在我国的应用实践中,这类模型虽已展现出对新污染物研究的潜在价值,但普遍受到参数获取不足、适配机制缺失以及验证体系不完善等限制.在未来研究中,应依托区域性数据库和统一化率定方法,构建适合我国典型场地情境的参数化与验证框架,并加强与饱和带模型的耦合集成,以实现对“源—汇”全过程的系统化与精细化刻画.

2.2　饱和带污染物迁移模型

饱和带模型主要模拟地下水系统中水流与污染物的输运过程[32].在水流模拟方面,MODFLOW 是当前国际上应用最广泛的地下水流数值模拟模型,由 USGS 开发[33],采用三维有限差分法求解达西定律与连续性方程.在溶质运移模拟方面,常采用 MT3D 或其增强版本 MT3DMS 将 MODFLOW 所计算得到的地下水流速场作为输入,进一步模拟污染物的对流-弥散-反应过程[34-35].该模型支持线性吸附、一阶降解反应及多步分裂算法,广泛用于地下水污染羽流演化、污染源追踪及典型场地新污染物暴露路径的定量评估.在建模效率与可视化方,诸如 Visual MODFLOW(Waterloo Hydrogeologic)与 GMS (Aquaveo)[36]等商业化平台已集成 MODFLOW、MT3D、MODPATH 等核心模块,具备图形化操作界面与可视化建模功能,有效提升了建模效率及模拟结果的直观性与解读性[37].

除了有限差分模型外,FEFLOW(Finite Element Flow)是一种广泛使用的有限元地下水建模工具,具有构建非结构化网格的灵活能力,可精准模拟岩层尖灭、不规则边界和倾斜含水层等复杂地质结构,特别适用于中小尺度、结构异质性显著的工业场地污染问题.FEFLOW 可同时模拟三维变饱和渗流与多组分溶质迁移,并支持非饱和特征曲线、密度驱动流、热传输等多过程耦合,具有更高的物理过程表达能力[38].

在中国,饱和带污染物迁移模型已在多类典型场地得到验证与应用.在西南喀斯特矿区,学者基于 MODFLOW-MT3DMS 模拟了 Mn^{2+}污染羽在裂隙-基质系统中的扩散,发现岩溶通道显著加快了污染物的迁移速率,凸显了该模型在特殊地质背景下的应用边界[39].此外,在长江中下游昆山地区的典型有机污染场地,研究者利用 MODFLOW-MT3DMS 对粉质黏土层污染物迁移进行了 30 年尺度的预测,结果与电阻率层析成像观测基本吻合,但发现模型对污染羽水平展布的再现不足,进一步表明浅层黏性土在长期吸脱水作用下渗透性可能急剧增强,是污染物横向迁移的重要驱动因素[40].相比之下,FEFLOW 作为有限元模型,擅长处理中小尺度含水层复杂结构与多物理耦合过程.更为突出.在长江经济带铬污染场地,FEFLOW 能够较好再现六价铬的迁移—衰减过程,并揭示了雨季水位波动下污染物在土-水系统间的再分布机制[41].

综上,MODFLOW/MT3D 系列模型在我国不同类型污染场地得到了较为广泛的应用,尤其适合于大尺度地下水系统的污染迁移模拟,而 FEFLOW 则在处理中小尺度复杂结构和多过程耦合方面展现出优势.这些案例不仅验证了 MODFLOW/MT3D 和 FEFLOW 在我国不同场地类型下的可行性与适用边界,也表明本土复杂地质条件对模型应用提出了更高挑战.如何在实际应用中更准确地获取关键参数、刻画动态水文过程,将是提升饱和带污染物迁移模拟可靠性和解释力的关键方向.

2.3　地球化学平衡模型

现有地下水模型主要聚焦于水动力学过程及溶质的物理迁移行为,如对流、机械弥散等.然而,在

新污染物的环境风险评估中,污染物的迁移与转化常伴随更为复杂的物理-化学-生物耦合机制,包括吸附-解吸、挥发-溶解、生物降解等多种非线性反应过程.传统地下水模型在过程机制刻画与多过程集成方面存在明显局限,难以满足新污染物在多路径、多机制下迁移行为的精细化模拟需求.

地球化学平衡模型通过模拟化学反应和热力学平衡,为新污染物环境行为的精细化研究提供了重要工具.PHREEQC[42]与 MINTEQA2[43]是其中应用最为广泛的代表性模型.以 PHREEQC 为例,该模型基于质量守恒与热力学平衡原理,能够模拟矿物溶解-沉淀、离子交换、表面络合、气-液交换等多种地球化学过程,并支持多组分反应体系中热力学与动力学过程的联合模拟.PHREEQC广泛应用于地下水-岩石-污染物相互作用机制的研究,可深入揭示污染物在微观层面的化学形态演化路径[42].

然而,单一地球化学模型通常假定系统处于静态或准稳态条件,难以反映流场驱动下污染物的时空迁移过程.为提升模拟能力,近年来研究者构建了多种“流动-迁移-反应”一体化耦合模型,显著增强了对污染物复杂环境行为的表征能力.其中,太平洋西北国家实验室(PNNL)开发的 RT3D(Reactive Transport in Three Dimensions)模型是典型代表.该模型在 MT3DMS 的基础上进行了功能扩展,引入可编程多组分反应模块,支持复杂的生物降解链式路径与协同反应构建,特别适用于有机类及生物可降解新污染物的行为模拟[44].2023 年 10 月,PNNL 发布了面向全氟和多氟烷基物质(PFAS)的 RT3D 专用模块,涵盖动力学受限吸附过程及 8:2FTOH 的转化反应,用于模拟 PFAS 在地下水中的迁移与演化过程[45].在国内应用方面,已有学者借助 RT3D 对北方某城市局部地区的四氯乙烯与三氯乙烯污染进行了溯源与输入强度反演.结果表明,两者在地下水中的浓度在 173d 监测期内显著衰减,而大气降水与包气带厚度是控制污染输入的关键因子,显示了该模型在多污染源识别与天然衰减评价中的潜力[46].

另一个典型模型为由美国地质调查局(USGS)开发的 PHAST(PHREEQC and HST3D),该模型能够模拟动态水力条件下污染物的迁移-反应-转化过程,尤其适用于刻画水-岩-污染物三相互作下的复杂化学演变路径[47].Brad Bessinger 和 Jason Melady 等开发了专用于预测 PFAS 地下水行为的热力学数据库,并利用 PHREEQC 与 PHAST 模拟了 PFAS 在有机质、黏土与铁氧氢化物表面的吸附机制,从而支持反应-运移模型(RTM)在水质改善趋势预测与污染超标风险识别中的应用[48].

综上所述,此类耦合模型显著提升了新污染物全过程迁移与反应行为的模拟完整性与预测精度,特别适用于其环境行为强烈依赖物理-化学-生物相互作用的情境.通过耦合水动力过程与地球化学/生物反应机制,这些模型可有效模拟污染物在多介质系统中的迁移-归趋路径、暴露浓度的时空分布及关键控制机制,为区域尺度的新污染物暴露评估与地下水污染风险管控提供了重要的技术支撑,已成为地下污染建模领域的重要发展方向之一.

2.4 模型验证方法与不确定性分析

在地下水污染物迁移建模中,模型验证与不确定性分析是确保模拟结果具有科学有效性和实际可用性的关键环节[49].前文已综述了多种主流非饱和带与饱和带模型,然而这些模型在具体场地中的推广与实际预测能力,最终仍需通过系统验证与量化不确定性分析予以支撑,以实现模型从“构建”走向“可信”的关键跃迁.

参数率定作为模型验证的前置过程,主要通过调整关键输入参数(如渗透系数、贮水率、污染源强度等),使模型输出尽可能逼近实测数据,从而提高模型对实际系统的再现能力[50].当前,基于监测井水位与污染物浓度的反演优化和历史数据拟合是最常采用的率定方式.以 PEST(Parameter ESTimation)为代表的自动化率定工具,通过引入 Levenberg-Marquardt 等非线性优化算法,可高效完成参数迭代更新与误差最小化计算,已广泛集成于 MODFLOW、FEFLOW 等主流建模平台中[51].相关研究表明,PEST 不仅能够显著降低模型模拟误差,还能提供目标函数演化路径与参数敏感性诊断,有助于识别影响模拟结果的关键因子[52].在长期监测数据较为完备的污染场地中,常采用历史拟合(history matching)方法,通过再现污染羽扩展过程中的水位和浓度变化趋势,进一步校准模型响应行为.此类方法在污染溯源与污染物迁移机制分析中具有较强适用性,能够提升模型在动态场景下的预测稳定性[53].

在完成参数率定之后,模型仍需通过独立验证环节检验其在非率定条件下的适用性与泛化能力.合理的验证应基于未参与率定的独立观测数据进行,例如额外布设的监测井数据或追加监测信息.验证过程通常包括对独立数据的模拟预测与实测值对比、对长期趋势的模拟再现,以及通过情景模拟进行结构合理性检验等方式[54].其中,独立数据对比是最直接的验证手段,也是国际上广泛采纳的标准流程.在国内外地下水建模技术导则中,均明确要求应使用空间上或时间上的独立数据集对模型进行检验,以避免过度拟合率定数据而导致的模型失真[55].此外,趋势对比可通过将校准后的模型用于预测较长时期内地下水位或污染物浓度变化,并与实际观测趋势进行对比,以评估模型对系统长期演化的刻画能力[56].当现场监测条件受限时,还可设计边界扰动、极端事件或人为干预等情景,间接测试模型结构的适应性与参数设定的物理合理性.多维度的验证机制不仅能够发现模型在非常规条件下的局限性,也有助于提升模型结果在环境管理中的应用信度.需要指出的是,模型验证应被视为一个动态迭代的过程,而非一次性的“验证通过”判定.模型在运行过程中应持续引入新数据和新工况进行更新与修正,从而不断提高其对系统真实行为的响应能力与预测精度[54].

相较于验证模型的结构合理性与再现能力,不确定性分析更关注模型结果的稳定性与风险范围.地下水模型的不确定性主要来源于参数设定、初始与边界条件、污染源特征以及模型结构等多个方面,若未加以识别和量化,将严重削弱模型预测结果在环境风险决策中的支撑作用[57].敏感性分析是开展不确定性分析的前提,旨在明确不同输入参数对模型输出的影响程度[58].局部敏感性分析通常通过对单一参数施加微小扰动,计算其对输出变量的变化率,适用于初步筛选控制性强的参数,但难以捕捉参数间的非线性交互效应[59].全局敏感性分析则在参数可能取值范围内进行多变量联合扰动,常用方法包括 Sobol’指数分析与 Morris 方法等,可通过方差分解或空间采样技术定量评估各参数及其交互项对输出方差的贡献,更适用于参数维度较高、系统复杂性较强的地下水模型[60].通过敏感性分析,不仅可提高率定与监测工作的针对性,也为模型结构优化与参数简化提供科学依据.

在不确定性传播分析方面,蒙特卡洛模拟是当前应用最广泛的技术路径.该方法通过为不确定输入参数赋予概率分布,生成大量样本组合并逐一运行模型,最终对输出结果进行统计汇总,构建置信区间或概率分布.蒙特卡洛模拟不依赖特定模型结构或线性假设,具有高度通用性,能够直接支持污染物超标概率评估、前沿推进区间预测等实际风险管理需求[61].为提高采样效率并减少计算成本,拉丁超立方抽样(LHS)等技术被广泛应用,其通过对输入空间的分层等概率抽样,可在较少样本量下实现均衡覆盖[62].在蒙特卡洛基础上发展出的 GLUE (Generalized Likelihood Uncertainty Estimation)方法,进一步通过设置行为阈值筛选“合理”模型样本,并对其加权分析,能够有效处理多组参数组合均可接受但预测差异显著的“等效率定”问题[61].此外,贝叶斯不确定性分析方法则以概率论为基础,通过结合观测数据对参数先验分布进行更新,从而推导输出变量的后验概率分布,适用于对预测可信度具有严格要求的情景模拟任务[63].目前,包括 MODFLOW、MT3D、FEFLOW 和 TOUGH 系列在内的主流建模平台均已集成敏感性分析与不确定性模拟功能,并形成了一定程度的工具链支持,为不确定性分析在实际项目中的常规化应用奠定了基础[64].

尽管当前地下水污染建模领域在模型验证与不确定性分析方面已取得一定进展,但在新污染物暴露建模中仍面临一系列现实挑战.其一,监测数据的匮乏与不连续仍是限制率定与验证深度的主要障碍,尤其是在污染场地前期调查不足或长期监测机制尚未建立的情况下,模型往往只能依赖有限数据进行率定,缺乏独立验证支撑,易导致结果可靠性偏低.其二,实验室尺度参数向现场尺度转化存在较大不确定性,例如吸附系数、降解速率等物性参数在非均质地下介质中常表现出显著时空变异性,直接应用可能引入结构性偏差,甚至造成“参数补偿效应”[65].其三,模型预测结果在实际表达与使用中往往缺乏对不确定性的明确传达,一些研究仍以确定性结果作为最终输出,忽视了模型输出的置信范围与风险边界,导致结果被过度解读甚至误用,降低其在风险评估与政策制定中的可信力与适用性[66].

表 1 典型污染物迁移与反应模型及其本土适用性比较

Table 1 Commonly used models for contaminant transport and reactive processes in the unsaturated and saturated zone

模型名称	分类	数值方法	主要特征	本土适用性	参考文献
TOUGH	非饱和带模型	控制体积法	适用于非等温多相流模拟,适合气-液-热多场耦合	已被生态环境部列为地下水溶质运移模拟工具之一,用于评估复杂条件下的污染物迁移	[20,67]
UNSATCHEM-2D	非饱和带模型	有限差分法	增强主要离子迁移建模能力,适用于盐碱土与营养盐研究	已有研究将其应用于中国灌区盐渍化防治研究,指导盐分控制措施设计	[68-69]
SWAP	非饱和带模型	有限差分法	模拟土壤-植被-大气系统耦合过程	已用于我国农田水文和盐渍化研究.例如有研究利用SWAP模拟石羊河流域土壤水盐动态及制种玉米产量,验证模型在干旱区咸水灌溉条件下的适用性;亦有研究将SWAP用于稻田土壤水分运移和作物产量的监测	[21,70-71]
HYDRUS (1D/2D/3D)	非饱和带模型	有限元法	基于 Richards 方程和对流-弥散方程,能够模拟非饱和区土壤水分和溶质的时空分布变化	在我国广泛用于农田土壤水盐运移和地下水污染入渗研究	[22,72-73]
MODFLOW+ MT3D	饱和带模型	有限差分	联合模拟地下水流动与溶质对流-弥散迁移,是污染羽模拟的标准工具	作为早期版本曾用于地下水污染物迁移研究,现已大多被 MT3DMS 取代;国家技术指南中仍将“MT3D”列为常用的溶质运移模拟工具	[35,67]
MODFLOW+ MT3DMS	饱和带模型	有限差分	MT3D 的升级版,支持单组分反应迁移与更强的数值稳定性	被纳入中国地下水污染场地模拟评估指南,作为标准工具使用;在典型场地地下水数值模型中应用最广泛	[34,67]
SEAWAT	饱和带模型	有限差分	集成多组分溶质与热量迁移过程,适用于密度依赖流场建模	在我国沿海地区应用广泛.例如利用 Visual MODFLOW 中的 SEAWAT 模块模拟大连海洋大学新区含水层的海水入侵过程,评估修建防渗墙前后的地下水盐度变化;在山东龙口、胶州湾大沽河流域等地构建 SEAWAT 模型预测海水入侵范围,为地下水管理提供科学依据	[74-76]
FEFLOW (2D/3D)	饱和带模型	有限元法	支持多相流、多组分迁移、热/盐水入侵与复杂边界建模,适用于复杂场地条件	被生态环境部指南列为捕获区计算的流场模拟工具;我国已有实际应用,如利用 FEFLOW 建立矿区地下水多源污染三维模型,预测不同工况下污染物迁移规律并指导监测井布局	[38,67,77]
PHREEQC	饱和带模型	化学平衡计算	支持多组分热力学与动力学反应建模,广泛用于水-岩-污染物系统研究	广泛用于我国地下水化学和污染研究.例如用于模拟污染地下水中金属的形态分布及反应过程,再与传输模型耦合预测污染羽演化.高放废物处置等领域也采用 PHREEQC 进行多组分迁移模拟,验证其在长期演化预测中的作用	[42,78-79]
RT3D	饱和带模型	有限差分法	可模拟多组分反应迁移与链式生物降解路径	我国在氯代烃地下水天然衰减模拟、场地生物修复方案优化等研究中有使用报道	[44-46]
PHAST	饱和带模型	有限差分+平衡计算	集成水流-热-反应建模,适用于动态迁移过程分析	主要用于科研验证复杂水文地球化学过程.由于计算复杂,工程实践中直接使用 PHAST 的情况较少,一般通过分步耦合其他模型替代	[47]

综上所述,模型验证与不确定性分析是地下水污染建模不可或缺的环节,也是提升模型科学性与决策支撑力的核心途径.未来研究亟需加强本土监测数据体系建设,完善多尺度参数获取与转化方法,并将不确定性识别与量化贯穿建模全过程,从而建立规范化、可推广的技术流程,为新污染物地下水风险评估与环境管理提供坚实的支撑.

3 模型融合与演化发展趋势

随着对地下水污染迁移机制理解的不断深化,以及数值模拟与信息技术的持续进展,地下水污染建模正逐步由单一介质、单过程的描述,向跨介质、多过程的一体化耦合方向演化.在典型工业场地中,污染源常与非饱和带、饱和带及地表水系统发生交互作用,形成跨尺度、多路径的迁移与暴露链条.为更直观地揭示这一复杂过程,图 2 模型展现了源—径—受的全过程传输关系,并为多过程耦合建模框架的构建提供了基础参照.在此基础上,相关研究围绕非饱和—饱和系统的水动力学耦合、多过程集成以及智能化建模路径展开探索,推动污染物暴露模拟在精细化与适用性方面不断发展.

3.1 非饱和-饱和系统的水动力耦合建模

非饱和带-饱和带一体化耦合已成为当前地下水污染建模的重要发展方向.传统建模方法中,非饱和区与饱和区通常被视为两个相对独立的系统,仅通过垂向渗漏通量等边界条件进行间接连接,难以

反映实际中存在的双向水力反馈及非稳态响应特征.为此,近年来提出了多种联立求解的耦合建模框架,推动非饱和带与含水层一体化建模的快速发展.

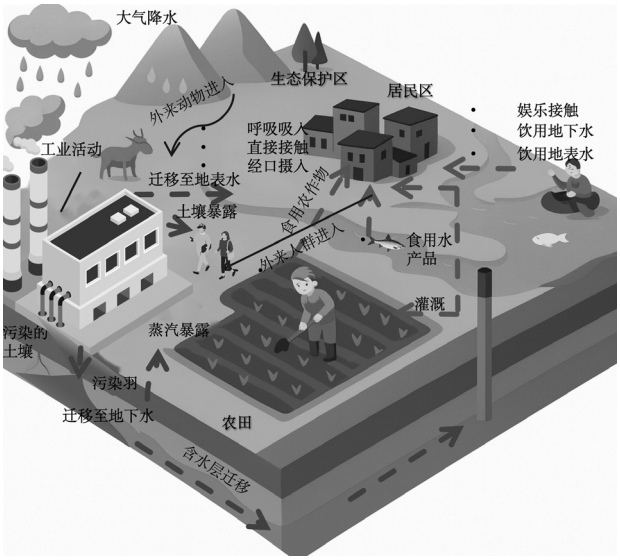


图 2　典型工业场地污染物迁移概念模型

Fig.2　Conceptual model of contaminant migration in a typical industrial site

当前耦合模型大致可分为两类:一类是全三维耦合模型,如 FEFLOW,其可在统一的空间结构中联立求解变饱和渗流与溶质迁移过程,具备较高的模拟精度和自由度,适用于地质结构复杂、污染过程耦合强的场地模拟.然而,该类模型对计算资源与建模能力要求较高,应用门槛相对较高[80];另一类是“一维-三维”耦合模型,如 HYDRUS-MODFLOW、SWAP-MODFLOW 等.该类模型通常将非饱和带简化为垂向一维结构,并与三维饱和含水层联动计算,兼顾了关键水文过程的表达能力与计算效率,适用于大多数实际工程场景.通过这种结构化耦合方式,模型不仅能有效模拟非饱和-饱和系统的动态交互过程,还显著降低了模型构建与运行成本,为污染物全过程模拟提供了更加可行的技术路径[81-82].

在以 MODFLOW 为核心构建的耦合模型中, UZF 与 VSF 模块代表了对非饱和带水流过程建模的两种不同路径.UZF 模块采用运动波法(kinematic wave method),计算效率较高,适用于大尺度水量平衡分析,但未能考虑毛管力驱动下的水分再分布过程,模拟精度受限[83];而 VSF 模块则基于 Richards 方程,能够更真实地刻画非饱和带内的水力梯度响应与垂向渗流过程,但也因此显著提高了计算复杂度和参数需求[84].为兼顾模拟精度与计算效率, HYDRUS for MODFLOW 提出了更为平衡的结构[85],采用一维 Richards 方程模拟垂向非饱和带水流,并与 MODFLOW 的三维饱和流场联动计算,适用于湿-干交替、水位波动等非稳态情境下的模拟需求[86-87].类似地,MODFLOW 也已成功与 SWAP 模型集成,通过 SWAP 计算非饱和带垂直通量作为 MODFLOW 的输入,而 MODFLOW 输出的平均地下水埋深则作为 SWAP 的底边界条件,从而实现模型间的信息双向耦合[81].

除上述结构化耦合模型外,MIKE SHE、HydroGeoSphere 与 SUTRA 等全集成水文模型具备从地表水、非饱和带到饱和带的全过程建模能力,广泛应用于跨介质、多过程耦合条件下的污染物迁移模拟研究.MIKE SHE 构建于 Freeze 与 Harlan 提出的水文循环耦合方程体系之上[87],支持地表-地下全过程模拟,已广泛应用于流域水资源管理、生态水文模拟与污染物输运分析[88-89].其通过有限体积-有限元法联合求解三维非饱和-饱和流动与溶质迁移方程,可在复杂水文地质结构与土地利用变动条件下精细刻画污染物扩散行为[90].SUTRA 模型则专注于模拟非饱和-饱和系统中流体、溶质与热量的耦合迁移,适用于模拟变密度渗滤液运移、热污染响应与盐水入侵等复杂水-热-盐耦合情境[91].

综上所述,非饱和-饱和系统的水动力耦合模型为污染物在地下多介质系统中的全过程迁移模拟提供了物理机制支撑与统一的数值计算框架.尽管近年来模型表达能力不断提升,但在高异质性地下结构、高频边界条件波动及监测数据稀缺等实际背景下,仍面临时间步控制、参数统一性与现场适用性等方面的挑战,亟需进一步优化与本地化适应提升.

3.2　多过程集成与复杂反应耦合

新污染物在地下环境中的迁移行为不仅受水动力过程控制,更依赖于其在迁移过程中的物理-化学-生物反应特性.如吸附-解吸、氧化还原、矿物沉淀-溶解、生物降解以及气-液交换等多种反应机制在空间与时间上交织作用,使污染物呈现出多路径、强非线性与动态响应特征.因此,地下水污染模拟模型的发展趋势正逐步由单一物理输运过程向“迁移-转化”全过程耦合集成方向演进.

为提升对上述复杂迁移-转化过程的刻画能力,当前研究主要沿两条路径推进建模工作:一是扩展

现有模型框架,增强其对多过程耦合机制的表达能力;二是整合不同领域模型,构建跨介质、跨机制的一体化耦合模拟体系.

在功能扩展方面,以 MODFLOW 为核心的地下水模拟体系得到了广泛拓展.MODFLOW 中的 UZF1、VSF、HYDRUS 与 SWAP 模块主要用于非饱和带-饱和带水流过程的模拟,若要进一步实现对污染物迁移-反应过程的模拟,则需引入溶质运移模块或对模型框架进行功能性改造.例如,Morway 等[82]通过修改 MT3DMS 源码并将其嵌入 MODFLOW-UZF1 框架,构建了 UZF-MT3DMS 模型,显著提升了在非饱和带条件下的模拟效率,显著提升了计算效率.Bailey 等[91]在此基础上集成 RT3D 模块,构建出支持复杂多组分反应路径的 UZF - RT3D 模型. Beegum 等则进一步将 HYDRUS、MODFLOW 与 MT3DMS 融合,构建了非饱和-饱和一体化的污染物迁移模拟平台,并成功应用于农药阿特拉津在土壤-地下水系统中的迁移模拟[88].

HYDRUS 与 PHREEQC 耦合形成的 HP1/HP2 模型,整合了非饱和带水-溶质迁移与地球化学反应模拟能力,适用于土壤-地下水界面中金属离子、药物残留等反应性污染物的行为分析[93]. PHT3D 模型则将 PHREEQC 嵌入 MT3D 框架中,实现了对地下水中酸碱中和、氧化还原、矿物溶解-沉淀、生物降解等多组分复杂反应的动态模拟,已广泛应用于地下水污染修复及抗生素环境归趋的相关研究[94].

表 2 主流非饱和带-饱和带耦合模型比较

Table 2 Comparative analysis of main coupled models for unsaturated-Saturated zone simulation

模型	年份	非饱和带水流描述	适用空间域	非饱和带中污染物传输情景的范围	计算效率	局限性	参考文献
MODFLOW-UZF-MT3DMS	2013	动力波方程	适用于大尺度区域水文模拟	可模拟对流、弥散及简单反应过程下的溶质迁移	计算效率较高,运行时间短	难以表达非饱和区二维/三维异质水流结构	[95]
MODFLOW-UZF-RT3D	2013	动力波方程	适用于区域尺度同质含水层系统	支持多组分反应性污染物迁移模拟	在同质土壤中表现出较高计算效率	对异质系统的适用性较差,空间结构表达能力有限	[92]
MODFLOW-HYDRUS-MT3DMS	2019	一维 Richard 方程	适用于土地利用变化与含水层异质性评估	可模拟溶质迁移、生物地球化学反应(如吸附、挥发、一阶降解等)	模拟精度高,随时间步长增加计算量加大	难以捕捉小尺度迁移变异,对复杂结构适应性受限	[96]
MIKE SHE	1995	简化重力流或双层水分平衡方程	适用于复杂地质条件下的三维地下水模拟	能模拟吸附、解吸、降解、植物吸收等过程的污染物迁移	小网格条件下计算量大,运行时间较长	模拟速度慢,内存需求高,模型构建周期较长	[97-98]
HydroGeoSphere	2012	三维修正 Richards 方程	适用于多孔隙介质、裂隙岩体及双孔系统	可模拟溶质迁移、热传输及一阶反应过程,支持复杂反应性物质建模	精度高但计算资源消耗大,运行时间较长	数据需求量大,参数收集成本高	[90,99]
SUTRA	1984	流体质量平衡方程	广泛用于各向异性渗透性地下系统	可模拟溶质迁移、吸附、反应、盐水入侵、变密度渗流与热传输	支持较大时间步长	多用于理论测试,预测性和现实适应性相对有限	[91,100]

为进一步比较不同建模方案在物理机制表达、计算效率与适用性的差异,本文整理了当前典型非饱和-饱和耦合模型的主要特征,涵盖非饱和带水流模拟方法、适用空间尺度、污染物迁移机制及模型运行性能等方面(表 2).在此基础上,结合典型工业场地的水文地质条件与建模目标,构建了模型选择决策树(图 3),以期为实际暴露模拟中的模型筛选与集成路径提供可操作的技术参考.

3.3 智能建模与数据驱动融合趋势

在新污染物面临多介质传输、多过程耦合的复杂环境背景下,传统物理模型凭借其坚实的理论基础与良好的可解释性,仍是地下污染迁移模拟的主要手段.然而,此类模型普遍存在计算开销大、构建周期长以及对输入参数依赖性强等问题,尤其在典型工业场景中,受限于现场参数不确定性和监测数据获取难度,其实际应用面临诸多挑战.近年来,数据驱动建模方法,特别是机器学习与深度学习技术的兴起,为污染物迁移过程建模提供了新的技术路径[101].凭借其强大的非线性函数逼近能力和模式识别优势,这类模型在高频观测数据支撑下表现出较高的建模效率与预测精度.然而,纯粹基于数据的模型通常缺乏物理机制约束,存在可解释性差、泛化能

力弱以及科学适用性受限等问题.因此,将数据驱动方法与物理模型进行有机融合的“物理−数据混合建模”(Physics−Informed Hybrid Modeling)策略,正逐渐成为污染建模领域的重要研究趋势[102].

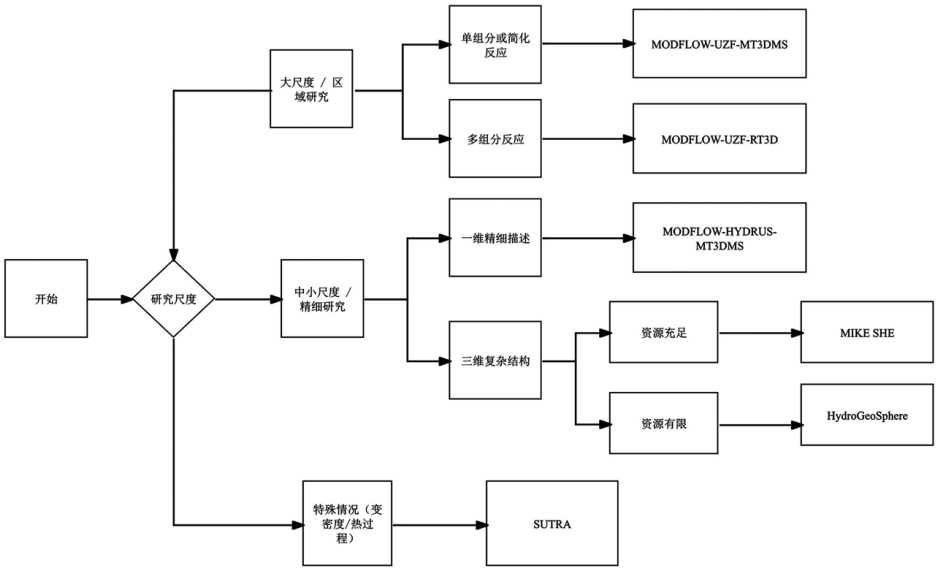


图 3　非饱和带 - 饱和带耦合模型选择决策树

Fig.3　Decision tree for selecting unsaturated−Saturated coupled models

一种典型的融合路径是利用数据驱动模型对物理模型输出进行误差校正.通过机器学习方法拟合物理模拟结果与实测数据之间的残差,可实现动态修正与模型精度提升.例如,Demissie 等[102]在 MODFLOW 框架中引入数据驱动模块,对地下水水头预测误差进行校正,使模型在校准与验证阶段的均方根误差(RMSE)降低高达 64%,显著减弱了误差的时空相关性,验证了该策略在工业污染场景中的可行性与实用价值.

另一类融合策略是基于物理模型生成的大量输入-输出数据,构建高效代理模型(Surrogate Model).该方法通过训练机器学习模型近似物理过程的映射关系,在保持预测精度的同时显著降低计算成本,适用于大尺度、复杂耦合系统的快速模拟.例如,Su 等构建了有限元模型与人工神经网络(ANN)、自适应神经模糊推理系统(ANFIS)相结合的混合代理模型,用于模拟区域尺度地下水位变化,其模拟精度提升约 14%,同时显著缩短了运行时间[103].Yu 等[104]进一步发展了深度学习模拟器,通过训练深度神经网络近似 MODFLOW 输出,实现了污染物浓度的高效预测,模型精度与效率均优于传统数值模型.在此基础上,代理建模逐步从“输出响应替代”向“子模块功能替代”方向演化.Chen 等[105]构建了基于径向基函数神经网络(RBF)的混合模型,用于学习 MODFLOW 中饱和带水动力过程的输入−输出关系(如补给量、蒸散发、水位响应),并替代其数值解算过程.进一步将该 RBF 模型与 HYDRUS、WOFOST 联合运行,在 OMS3 平台上构建了涵盖作物−非饱和带 - 饱和带全过程的集成建模链,实现从地表蒸腾到地下水响应的闭环模拟.结果表明,在保持模拟精度的同时,模型在高分辨率网格及复杂边界条件下展现出良好的计算效率与系统一致性.

更深层次的融合策略则表现为物理引导的机器学习(PGML).该类方法在模型训练过程中嵌入质量守恒、能量守恒等物理约束,显著提升了模型的物理一致性与泛化能力.Wang 等[106]提出的可微分物理−深度学习框架已成功应用于亚马孙流域的多源数据融合与地下水动态模拟;Adombi 等[107]则在加拿大非承压含水层中验证了理论引导机器学习模型(TgMLP)在解释性与预测精度方面的优势.此外,图神经网络(GNN)与注意力机制(Attention Mechanism)等新兴算法也逐步应用于污染源识别与羽状体演化路径预测等复杂场景,展现出良好的拓展性与实际应用潜力[108].

综上所述,智能建模与物理机制融合为新污染物迁移模拟提供了新思路与技术支撑.在提升模拟

效率与动态响应能力的同时,也对模型的机制透明度与可操作性提出更高要求.未来,“AI+物理”建模框架有望进一步结合高分辨率传感网络、实时数据采集系统与数字孪生平台,构建具备自适应建模、预警能力与智能决策功能的一体化污染管理系统,推动评估模型由预测工具向智慧化平台的转型升级.

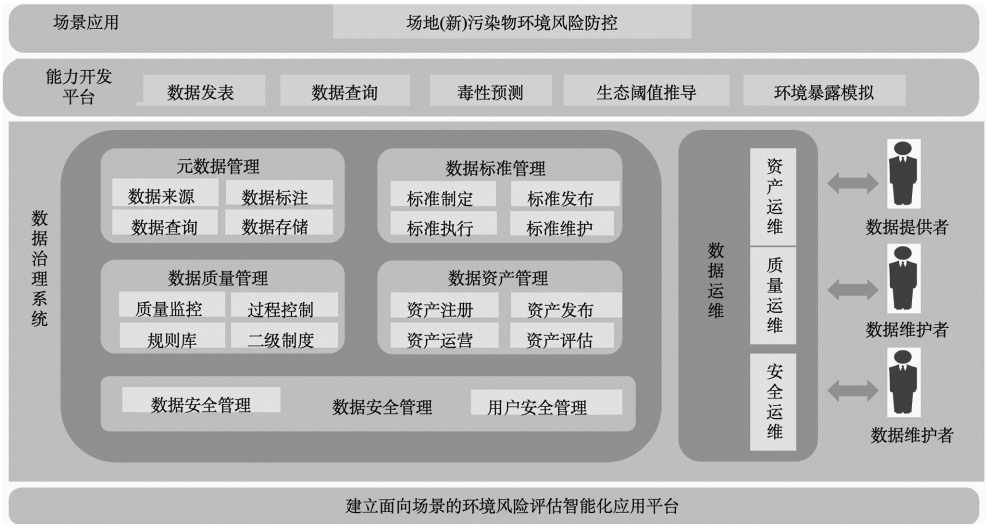


图 4 面向场景的环境风险评估智能化平台架构

Fig.4 Architecture diagram of the intelligent environmental risk assessment platform for site-based applications

4 本土化土壤-地下水耦合暴露模型发展路径

随着“十四五”新污染物治理战略的深入推进,构建适用于我国典型地质、水文与污染场景的土壤-地下水耦合暴露模型体系,已成为环境风险评估技术体系完善与场地环境管理精细化的关键研究方向.尽管近年来一体化建模技术在我国部分工业污染场地的风险评估中得到初步应用,但现有模型多源于欧美国家,其参数体系、路径假设及计算结构与我国复杂多样的自然与污染条件存在显著适配性差异.因此,亟需面向中国典型污染场景,推动模型的本土化重构与评估平台的系统集成.

4.1 本土化全过程耦合模型构建

在本土化模型构建过程中,充分借鉴国际主流模拟软件的成熟优势,构建适用于我国工业污染场地的耦合暴露模型体系,是提升风险评估科学性与工程适用性的可行路径.目前,HYDRUS、MODFLOW 及其配套的 MT3DMS 等软件已广泛应用于土壤-地下水系统模拟,并在污染物迁移规律、多介质动态响应及机制耦合刻画方面积累了丰富的工程经验.通过开发高效的数据接口与中间计算模块,可实现非饱和带与饱和带之间的过程联动,构建跨介质动态模拟平台,从而准确模拟污染物在垂向渗透-平面扩散-地下水迁移全过程中的浓度变化与空间分布.该类集成建模框架具备良好的机制表达能力与可扩展性,为本土化建模奠定了技术基础.

然而,国际模型在我国工业场地的直接应用仍面临显著适配性障碍,主要体现在地质结构复杂、含水层非均质性强、水文过程区域性显著及污染源组成多元等方面.例如,MODFLOW 默认的等厚含水层假设、统一孔隙度设定、线性吸附参数等简化处理方式,难以准确反映我国污染场地中存在的断裂发育、承压含水层-裂隙水复合结构、水力梯度突变等实际情形.因此,在具体建模过程中,应针对本地场地特征开展主控机制因子的识别与修正,重点包括土壤与岩体的渗透性、吸附-解吸系数、水文边界条件、污染物反应速率常数等关键参数,并基于区域实测数据进行优化改正.

同时,构建科学合理、具有代表性的“标准情境”是确保暴露模型在区域推广中的通用性和风险控制能力的核心环节.对于工业污染场地而言,基于“现实中最糟糕的情况”(worst-case scenario)原则构建标准场景可为风险评估提供保守边界,有助于加强风险管理中的预警功能[109].中国地域广阔,不同区域在土壤类型、地下水系统、水文气候条件及污染源结构等方面存在显著差异,决定了污染物迁

移与暴露机制的空间异质性.例如,华北平原农业区长期地下水超采导致垂向渗流通道显著,污染物易从地表渗透至深层含水层;长三角工业密集区则受限于复杂地层结构与复合污染源,污染迁移呈现多路径、多机制耦合特征;而西南岩溶区地下水系统发育活跃,污染扩散具有突发性与不确定性[110].在此基础上,应构建覆盖我国典型工业地质环境的标准化建模情境,包括北方农业-工业复合区、高承压地下水区及岩溶裂隙水渗漏区等情形,构建具有代表性和区域适应性的“最坏暴露场景”.China-PEARL 模型在中国农业区的标准情境构建中,已探索出融合气候区划、土壤类型与土地利用数据的建模路径,其经验对工业场地建模具有重要借鉴意义[111].同时,欧盟 FOCUS 模型在不同环境区划下的分情景构建方法也可为我国情景结构标准化提供参考[112].

4.2　本土化数据库建设

高质量的参数数据库是支撑土壤–地下水耦合模型实现本地化建模与情境适配的核心要素.在我国典型工业场地新污染物暴露与风险模拟过程中,污染源特征、迁移行为参数和毒性因子三类关键信息体系仍存在较大缺口,成为限制模型精度提升和政策落地应用的关键瓶颈.

首先,我国新污染物的源项数据仍较为薄弱.有机磷阻燃剂、全氟化合物等新污染物广泛存在于精细化工、电子制造、电镀等高风险行业,但由于历史生产资料缺失、排放过程监控不足,源项识别精度和释放强度估算存在高度不确定性[113].因此,应通过行业名录解析、工艺路径梳理与实地监测协同,建立涵盖重点行业的新污染物清单,系统明确污染物种类、来源路径与排放特征,为模型初始条件与边界设定提供支撑依据.

其次,新污染物迁移参数的本土适配性不足.许多关键参数(如有机碳分配系数 K_{oc}、土-水分配系数 K_d、水力传导率等)主要基于欧美实验数据,难以反映我国典型土壤(如黄土、红壤)在结构、矿物组成和水文条件方面的差异.例如,黄土区土壤孔隙度大、渗透性强,污染物迁移性高;而红壤区富含铁铝氧化物,污染物吸附能力强,这些地域差异将显著影响污染物在土-水系统中的迁移行为[114].为提升模型参数的本地适应性,需在不同区域建立田间试验平台,开展土柱实验、现场渗透与吸附试验、稳定同位素示踪等研究,获取代表性迁移参数,构建覆盖多种土壤类型的本地迁移参数数据库.同时,应建立统一的参数测定标准方法,确保各区域获得的参数具有可比性和可靠性,为模型精细化与本土化提供有力支撑.

再次,毒性参数缺失制约了健康风险评估的准确性.欧美国家相继建立了如 IRIS、RAIS、HHBPs、ChemSpider 及 PubChem 等等毒性数据库[115−118],为环境健康研究和政策制定提供了重要支撑.然而,我国目前可用的毒性数据库(如中科院上海有机所的环境化学毒性防治数据库、药物在线平台的化学物质数据库,以及由中科院南京土壤所和生态环境部南京环科所开发的电子表格工具)虽然是国内较具代表性的公益性数据库资源,但基础数据仍大量依赖国外资料,缺乏针对本土生态系统和人群的毒性参数校准[118].尤其是本土代表性物种的生态毒性数据和暴露剂量-反应关系极为稀缺,严重限制了风险评估的科学性和现实适用性.因此,有必要加强面向本土生态系统和人群的毒性参数研究.例如,开展本土代表物种的生态毒理试验和人群暴露剂量-反应关系研究,并制定适用于我国环境的毒性参数测定标准.通过将这些数据充实到国内数据库,并对国外数据进行本土化校准,可逐步建立完善的本土毒性参数数据库,从而提高风险评估的科学性和现实适用性.

4.3　一体化风险评估平台集成开发

目前,我国土壤-地下水耦合模型在污染场地环境管理中的应用效果有限,关键问题在于模型技术体系与实际管理流程之间缺乏有效衔接.自 2017 年起,我国启动了重点行业企业用地的土壤污染状况调查,并陆续出台了《在产企业地块风险筛查与风险分级技术规定(试行)》与《关闭搬迁企业地块风险筛查与风险分级技术规定(试行)》[5].上述政策文件明确提出以“污染源-迁移路径-暴露受体”为主线的全过程分析框架,强调风险评估应覆盖污染物的产生、迁移过程以及对人体健康或生态环境的影响,从而据此确定风险等级与管理优先级.这一政策导向不仅提出了对全过程耦合分析的技术要求,也为模型平台的标准化输出和监管对接提供了制度支撑.

在此背景下,亟需构建一个集“污染识别-迁移模拟-风险评估”于一体的综合评估平台,推动模型

工具从科研阶段向管理支撑系统的系统化转型(图4).平台应首先以场地历史资料解析、典型工业工艺链分析及新污染物名录比对为基础,识别潜在污染物种类、排放源位置及释放强度;同时,调用新污染物数据库提取其理化性质与环境行为参数,为过程建模提供数据支持.在迁移过程建模方面,平台需集成多相流模拟、地下水水动力学建模、溶质迁移及地球化学反应耦合模块,实现对非饱和带与饱和带中污染物迁移与转化过程的动态模拟,全面考虑吸附-解吸、氧化还原、沉淀-溶解等关键控制机制.在风险评估环节,平台应基于模拟结果中污染物的浓度分布及其时空演变特征,结合多种暴露路径与生物响应参数,定量评估不同受体(如居民、农作物、水生生物等)在多种典型情境下的暴露剂量与健康风险,实现对致癌性、非致癌性及生态计算结果与国家及地方的土壤环境质量标准、风险筛查值及阈值进行比对,判定地块的风险等级,并输出格式统一、内容标准化的评估报告与管理建议,确保评估成果能够直接服务于风险筛查、地块分类、修复优先排序等管理流程,助力我国新污染物暴露评估体系朝“科学-技术-政策”三位一体融合发展方向迈进.

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):14.
Liu P, Huang H M, Yu T, et al. Current situation, problems and control countermeasures of emerging contaminants in China [J]. Environmental Monitoring and Early Warning, 2022,14(5):14.

[2] 易 川,徐春燕,高 盼,等.典型电解氟化工场地全/多氟化合物的污染特征及健康风险评估 [J]. 环境工程, 2025,43(5):221-232.
Yi C, Xu C Y, Gao P, et al. Pollution characteristics and health risk assessment of per- and polyfluoroalkyl substances at a typical electrofluorination industrial site [J]. Environmental Engineering, 2025,43(5):221-232.

[3] 牛 颖,安 圣,陈 凯,等.2012~2021 年中国地下水抗生素污染现状及分析技术研究进展 [J]. 岩矿测试, 2023,42(1):39-58.
Niu Y, An S, Chen K, et al. Antibiotic contamination in groundwater of China during 2012~2021 and advances in analytical techniques [J]. Rock and Mineral Analysis, 2023,42(1):39-58.

[4] 李佳乐,张彩香,王焰新,等.太原市小店污灌区地下水中多环芳烃与有机氯农药污染特征及分布规律 [J]. 环境科学, 2015,36(1):172-178.
Li J L, Zhang C X, Wang Y X, et al. Pollution characteristics and spatial distribution of polycyclic aromatic hydrocarbons and organochlorine pesticides in groundwater of the Xiaodian sewage irrigation area, Taiyuan City [J]. Environmental Science, 2015,36(1):172-178.

[5] 王 腾.面向新污染物风险治理的环境监管 [J]. 中国人口·资源与环境, 2024,34(1):106-117.
Wang T. Environmental regulation for risk governance of emerging contaminants [J]. China Population, Resources and Environment, 2024,34(1):106-117.

[6] 生态环境部.关于加强重点行业涉新污染物建设项目环境影响评价工作的意见 [EB/OL]. [2025-04-10]. https://www.mee.gov.cn/xxgk2018/xxgk/xxgk03/202504/t20250414_1114642.html.
Ministry of Ecology and Environment of the People's Republic of China. Opinions on strengthening environmental impact assessment of construction projects involving emerging contaminants in key industries [EB/OL]. [2025-04-10]. https://www.mee.gov.cn/xxgk2018/xxgk/xxgk03/202504/t20250414_1114642.html.

[7] Singh A. Groundwater resources management through the applications of simulation modeling: A review [J]. Science of the Total Environment, 2014,499:414-423.

[8] Labad F, Ginebreda A, Criollo R, et al. Occurrence, data-based modelling, and risk assessment of emerging contaminants in an alluvial aquifer polluted by river recharge [J]. Environmental Pollution, 2023,316:120504.

[9] 卢洪健,王卓然.地下水模拟方法与应用软件研究进展 [J]. 地下水, 2022,44(6):49-52.
Lu H J, Wang Z R. Research progress on groundwater simulation methods and application software [J]. Groundwater, 2022,44(6):49-52.

[10] 李春平,吴 骏,罗 飞,等.某有机化工污染场地土壤与地下水风险评估 [J]. 土壤, 2013,45(5):933-939.
Li C P, Wu J, Luo F, et al. Risk assessment of soil and groundwater at an organic chemical contaminated site [J]. Soils, 2013,45(5):933-939.

[11] Sarma R, Singh S K. Simulating contaminant transport in unsaturated and saturated groundwater zones [J]. Water Environment Research, 2021,93(9):1496-1509.

[12] Todd D K, Mays L W. Groundwater hydrology [M]. Hoboken: John Wiley & Sons, 2004.

[13] Nielsen D, Van Genuchten M T, Biggar J. Water flow and solute transport processes in the unsaturated zone [J]. Water Resources Research, 1986,22(9S):89S-108S.

[14] Vogel T. SWMII—Numerical model of two-dimensional flow in a variably saturated porous medium [R]. Wageningen: Agricultural University, Department of Hydraulics and Catchment Hydrology, 1988.

[15] Neuman S P. Finite element computer programs for flow in saturated-unsaturated porous media [M]. Haifa: Technion Research and Development Foundation, Hydrodynamics & Hydraulic Division, 1972.

[16] Davis L, Neuman S P. Documentation and user's guide: UNSAT2—variably saturated flow model (including four example problems). Final report [R]. Fort Collins, CO: Water, Waste and Land Inc., 1983.

[17] Šimůnek J, Van Genuchten M T, Sejna M. The HYDRUS-1D software package for simulating the one-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably-saturated media [R]. Riverside, CA: University of California-Riverside, 2005, Report 3:1-240.

[18] Šimůnek J, Van Genuchten M T, Šejna M. The HYDRUS software package for simulating two- and three-dimensional movement of

water, heat, and multiple solutes in variably-saturated media [R]. Riverside, CA: University of California-Riverside, Technical Manual, Version 2006, Report 1: 1-241.

[19] Šimůnek J, Van Genuchten M Th, Šejna M. Development and applications of the HYDRUS and STANMOD software packages and related codes [J]. Vadose Zone Journal, 2008,7(2):587-600.

[20] Finsterle S, Doughty C, Kowalsky M, et al. Advanced vadose zone simulations using TOUGH [J]. Vadose Zone Journal, 2008,7(2): 601-609.

[21] Van Dam J C, Groenendijk P, Hendriks R F, et al. Advances of modeling water flow in variably saturated soils with SWAP [J]. Vadose Zone Journal, 2008,7(2):640 - 653.

[22] Healy R W. Simulating water, solute, and heat transport in the subsurface with the VS2DI software package [J]. Vadose Zone Journal, 2008,7(2):632-639.

[23] Panday S, Huyakorn P S. MODFLOW Surfact: A state-of-the-art use of vadose zone flow and transport equations and numerical techniques for environmental evaluations [J]. Vadose Zone Journal, 2008,7(2): 610-631.

[24] Lyu S, Chen W, Qian J, et al. Prioritizing environmental risks of pharmaceuticals and personal care products in reclaimed water on urban green space in Beijing [J]. Science of the Total Environment, 2019,697:133850.

[25] 张步迪,林　青,徐绍辉.磺胺嘧啶在原状土柱中的运移特征及模拟 [J]. 土壤学报, 2018,55(4):879-888.
Zhang B D, Lin Q, Xu S H. Transport characteristics and simulation of sulfamethazine in undisturbed soil columns [J]. Acta Pedologica Sinica, 2018,55(4):879-888.

[26] 张　惠,林　青,徐绍辉.磺胺嘧啶在覆铁石英砂中迁移特征及数值模拟 [J]. 中国环境科学, 2019,39(11):4712-4721.
Zhang H, Lin Q, Xu S H. Migration characteristics and numerical simulation of sulfamethazine in iron-coated quartz sand [J]. China Environmental Science, 2019,39(11):4712-4721.

[27] 尹芝华,杜青青,翟远征,等.利用 HYDRUS-2D 软件模拟污染事故后三氮污染物的迁移转化规律 [J]. 环境污染与防治, 2017,39(10): 1071-1076.
Yin Z H, Du Q Q, Zhai Y Z, et al. Simulation of migration and transformation of tri-nitrogen pollutants after accidental pollution based on HYDRUS-2D [J]. Environmental Pollution and Control, 2017,39(10):1071-1076.

[28] 马　颖,段绍祎,雷慧闽.适用于河套平原典型作物的 SWAP 模型参数 [J]. 农业工程学报, 2025,41(9):73-80.
Ma Y, Duan S Y, Lei H M. SWAP model parameters for typical crops in Hetao Plain [J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2025,41(9):73-80.

[29] 林　绿,覃志豪,李文娟.我国农药地下水环境风险评估场景体系的建立 [J]. 农业环境科学学报, 2014,33(11):2194-2203.
Lin L, Qin Z H, Li W J. Establishment of scenario system for groundwater environmental risk assessment of pesticides in China [J]. Journal of Agro-Environment Science, 2014,33(11):2194-2203.

[30] 孙　超,徐　超,孙宗全,等.基于 TMVOC 的有机污染场地热强化气相抽提修复效果模拟 [J]. 环境科学研究, 2023,36(1):198-207.
Sun C, Xu C, Sun Z Q, et al. Simulation of thermally enhanced soil vapor extraction for remediation of organic contaminated sites based on TMVOC [J]. Research of Environmental Sciences, 2023,36(1): 198-207.

[31] Gaur S, Chahar B R, Graillot D. Combined use of groundwater modeling and potential zone analysis for management of groundwater [J]. International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation, 2011,13(1):127-139.

[32] Harbaugh A W, Mcdonald M G. Programmer's documentation for MODFLOW-96, an update to the US Geological Survey modular finite-difference ground-water flow model [R]. US Geological Survey, 1996.

[33] Zheng C, Wang P P. MT3DMS: a modular three-dimensional multispecies transport model for simulation of advection, dispersion, and chemical reactions of contaminants in groundwater systems: documentation and user's guide [R]. Vicksburg, MS: US Army Corps of Engineers, 1999.

[34] Zheng C. MT3D: a modular three-dimensional transport model for simulation of advection, dispersion and chemical reactions of contaminants in groundwater systems [M]. New York: SS Papadopulos & Associates, 1992.

[35] Group S S. Groundwater Modeling System (GMS) [M]. Chichester: John Wiley & Sons, 2006.

[36] Pathak R, Awasthi M K, Sharma S K, et al. Ground water flow modelling using MODFLOW: a review [J]. International Journal of Current Microbiology and Applied Sciences, 2018,7(2):83-88.

[37] Diersch H J G. FEFLOW: finite element modeling of flow, mass and heat transport in porous and fractured media [M]. Berlin: Springer, 2014.

[38] 马宇琪,徐世光.基于GMS的某矿区地下水污染的数值模拟研究 [J]. 地质灾害与环境保护, 2024,35(1):123-128.
Ma Y Q, Xu S G. Numerical simulation of groundwater pollution in a mining area based on GMS [J]. Journal of Geological Hazards and Environment Preservation, 2024,35(1):123-128.

[39] Gao C, Guo X, Shao S, et al. Using MODFLOW/MT3DMS and electrical resistivity tomography to characterize organic pollutant migration in clay soil layer with a shallow water table [J]. Environmental Technology, 2021,42(28):4490-4499.

[40] 刘　玲,陈　坚,牛浩博,等.基于 FEFLOW 的三维土壤 - 地下水耦合铬污染数值模拟研究 [J]. 水文地质工程地质, 2022,49(1):164-174.
Liu L, Chen J, Niu H B, et al. Three-dimensional numerical simulation of coupled soil - groundwater chromium contamination based on FEFLOW [J]. Hydrogeology & Engineering Geology, 2022, 49(1):164-174.

[41] Parkhurst D L, Wissmeier L. PhreeqcRM: a reaction module for transport simulators based on the geochemical model PHREEQC [J]. Advances in Water Resources, 2015,83:176-189.

[42] Kocaoba S, Akcin G. Removal and recovery of chromium and chromium speciation with MINTEQA2 [J]. Talanta, 2002,57(1):23-30.

[43] Clement T P. A modular computer code for simulating reactive multi-species transport in three-dimensional groundwater systems [R]. Richland, WA: Pacific Northwest National Laboratory, 1999.

[44] Johnson C D, Bagwell C E, Bence R L. Development of scalable reactive transport framework for PFAS [R]. Richland, WA: Pacific

Northwest National Laboratory, 2023.

[45] 王树芳,王丽亚,王晓红,等.溶质迁移模型在地下水有机污染源识别中的应用 [J]. 环境科学, 2012,33(3):760-770.
Wang S F, Wang L Y, Wang X H, et al. Application of solute transport models in identification of organic pollution sources in groundwater [J]. Environmental Science, 2012,33(3):760-770.

[46] Zhou Y, Liang Y, Lynch K H, et al. PHAST: a fast phage search tool [J]. Nucleic Acids Research, 2011,39(Suppl.2):W347-W352.

[47] Saleem H. Mathematical modeling and analysis of competitive adsorption of multi-component PFAS and reactive transport of PFAA precursors in the vadose zone [D]. Tucson: The University of Arizona, 2024.

[48] Gonçalves T D, Fischer T, Gräbe A, et al. Groundwater flow model of the Pipiripau watershed, Federal District of Brazil [J]. Environmental Earth Sciences, 2013,69(2):617-631.

[49] Moore C, Doherty J. The cost of uniqueness in groundwater model calibration [J]. Advances in Water Resources, 2006,29(4):605-623.

[50] Hassan A E. A methodology for validating numerical ground water models [J]. Groundwater, 2004,42(3):347-362.

[51] 李 衡,周义朋.基于 PEST 的地下水模型参数优化及不确定性分析 [J]. 科学技术与工程, 2019,19(26):88-93.
Li H, Zhou Y P. Parameter optimization and uncertainty analysis of groundwater model based on PEST [J]. Science Technology and Engineering, 2019,19(26):88-93.

[52] Hill M C, Tiedeman C R. Effective groundwater model calibration: with analysis of data, sensitivities, predictions, and uncertainty [M]. Hoboken: John Wiley & Sons, 2007.

[53] Condon L E, Kollet S, Bierkens M F P, et al. Global groundwater modeling and monitoring: opportunities and challenges [J]. Water Resources Research, 2021,57(12):e2020WR029500.

[54] 地下水环境状况调查评价工作指南 [Z]. 北京:生态环境部, 2019.
Technical guideline for investigation and assessment of groundwater environmental status [Z]. Beijing: Ministry of Ecology and Environment of the People's Republic of China, 2020.

[55] El-Rawy M, Zijl W, Salem A, et al. Fundamentals of groundwater modeling methods and a focused review on the groundwater models of the Nile Valley Aquifer[J]. Sustainability of Groundwater in the Nile Valley, Egypt, 2022:39-70.

[56] Duan Q, Schaake J, Andréassian V, et al. Model Parameter Estimation Experiment (MOPEX): An overview of science strategy and major results from the second and third workshops [J]. Journal of Hydrology, 2006,320(1/2):3-17.

[57] 于晓露,宋 健,林 锦,等.典型内陆湖区地下水数值模拟及其主控因子识别 [J]. 水文地质工程地质, 2022,49(6):24-33.
Yu X L, Song J, Lin J, et al. Numerical simulation of groundwater in a typical inland lake area and identification of dominant controlling factors [J]. Hydrogeology & Engineering Geology, 2022,49(6):24-33.

[58] Christopher Frey H, Patil S R. Identification and review of sensitivity analysis methods [J]. Risk Analysis, 2002,22(3):553-578.

[59] 刘希琛,阚光远,梁 珂.流域水文模型参数不确定性量化技术研究进展 [J]. 山东农业大学学报(自然科学版), 2023,54(3):468-476.
Liu X C, Kan G Y, Liang K. Research progress on quantification techniques of parameter uncertainty in watershed hydrological models [J]. Journal of Shandong Agricultural University (Natural Science Edition), 2023,54(3):468-476.

[60] Dwivedi Y K, Kshetri N, Hughes L, et al. Opinion paper: "So what if ChatGPT wrote it?" Multidisciplinary perspectives on opportunities, challenges and implications of generative conversational AI for research, practice and policy [J]. International Journal of Information Management, 2023,71:102642.

[61] Sharan A, Datta B, Lal A. Stochastic application in the numerical simulation model for groundwater salinity management and decision-making [M] // Geospatial technologies for integrated water resources management: Mapping, modelling, and decision-making. Cham: Springer Nature Switzerland, 2024:189-208.

[62] Fatichi S, Vivoni E R, Ogden F L, et al. An overview of current applications, challenges, and future trends in distributed process-based models in hydrology [J]. Journal of Hydrology, 2016,537:45-60.

[63] Fatichi S, Vivoni E R, Ogden F L, et al. An overview of current applications, challenges, and future trends in distributed process-based models in hydrology [J]. Journal of Hydrology, 2016,537:45-60.

[64] Dong Y, Jiang Z, Hu Y, et al. Pathogen contamination of groundwater systems and health risks [J]. Critical Reviews in Environmental Science and Technology, 2024,54(4):267-289.

[65] Lykkegaard M B, Dodwell T J, Moxey D. Accelerating uncertainty quantification of groundwater flow modelling using a deep neural network proxy [J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2021,383:113895.

[66] T/GIA 005-2020 受污染地下水抽出-处理修复技术指南 [S].
T/GIA 005-2020 Technical guideline for pump-and-treat remediation of contaminated groundwater [S].

[67] 郭志萍,李 斌,孙西欢,等.不同生态修复模式下土壤水文性质及其对溶质运移的影响 [J]. 环境科学学报, 2019,39(12):4251-4260.
Guo Z P, Li B, Sun X H, et al. Effects of different ecological restoration modes on soil hydraulic properties and solute transport [J]. Acta Scientiae Circumstantiae, 2019,39(12):4251-4260.

[68] Šimůnek J, Suarez D L. UNSATCHEM-2D code for simulating two-dimensional variably saturated water flow, heat transport, carbon dioxide production and transport, and multicomponent solute transport with major ion equilibrium and kinetic chemistry [R]. Riverside, CA: Agricultural Research Service, US Department of Agriculture, 1993.

[69] 马 颖,段绍祎,雷慧闽.适用于河套平原典型作物的 SWAP 模型参数 [J]. 农业工程学报, 2025,41(9):73-80.
Ma Y, Duan S Y, Lei H M. SWAP model parameters for typical crops in the Hetao Plain [J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2025,41(9):73-80.

[70] 徐 旭,黄冠华,屈忠义,等.区域尺度农田水盐动态模拟模型——GSWAP [J]. 农业工程学报, 2011,27(7):58-63.
Xu X, Huang G H, Qu Z Y, et al. GSWAP: a regional-scale dynamic simulation model for farmland water and salt transport [J]. Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, 2011,27(7):58-63.

[71] 王涛涛,张 蓓,陈慧华,等.HYDRUS 及其耦合模型研究与应用进展 [J]. 水文地质工程地质, 2025,52(2):72-84.
Wang T T, Zhang B, Chen H H, et al. Research progress and applications of HYDRUS and its coupled models [J]. Hydrogeology &

Engineering Geology, 2025,52(2):72−84.

[72] 地下水污染模拟预测评估工作指南(试行) [S].
Technical guideline for simulation, prediction and assessment of groundwater pollution (Trial) [S].

[73] Langevin C D, Thorne Jr D T, Dausman A M, et al. SEAWAT version 4: a computer program for simulation of multi−species solute and heat transport [R]. US Geological Survey, 2008.

[74] 陈开荣,陈汉宝,赵海亮.基于 SEAWAT 的海水入侵数值模拟 [J]. 水资源与水工程学报, 2012,23(6):140−145.
Chen K R, Chen H B, Zhao H L. Numerical simulation of seawater intrusion based on SEAWAT [J]. Journal of Water Resources and Water Engineering, 2012,23(6):140−145.

[75] 李岱远,施　睿,吴永祥,等.变化环境下区域海水入侵数值模拟与影响因素分析 [J]. 水利水运工程学报, 2024,(4):1−14.
Li D Y, Shi R, Wu Y X, et al. Numerical simulation and influencing factors of regional seawater intrusion under changing environment [J]. Journal of Waterway and Harbor, 2024,(4):1−14.

[76] 李　锐,张　行,张正鑫.基于 FEFLOW 的大型矿区地下水多源污染风险评价及长效监控机制研究——以某大型铜钼矿区为例 [J]. 矿山工程, 2018,7:76−82.
Li R, Zhang X, Zhang Z X. Risk assessment and long−term monitoring mechanism of multi−source groundwater pollution in a large mining area based on FEFLOW: a case study of a large copper−molybdenum mine [J]. Mining Engineering, 2018,7:76−82.

[77] 邱文杰,宋　健,吴剑锋,等.污染场地地下水中汞污染反应运移模拟 [J]. 环境科学学报, 2020,40(7):2502−2510.
Qiu W J, Song J, Wu J F, et al. Reactive transport simulation of mercury contamination in groundwater at a polluted site [J]. Acta Scientiae Circumstantiae, 2020,40(7):2502−2510.

[78] 谢水波,陈泽昂,张晓健,等.铀尾矿库区浅层地下水中 U(VI)迁移的模拟 [J]. 原子能科学技术, 2007,41(1):58−64.
Xie S B, Chen Z A, Zhang X J, et al. Simulation of U(VI) migration in shallow groundwater of a uranium tailings area [J]. Atomic Energy Science and Technology, 2007,41(1):58−64.

[79] Koukidou I, Panagopoulos A. Application of FEFLOW for the simulation of groundwater flow at the Tirnavos (central Greece) alluvial basin aquifer system [J]. Bulletin of the Geological Society of Greece, 2017,43(4):1747−1756.

[80] Xu X, Huang G, Zhan H, et al. Integration of SWAP and MODFLOW−2000 for modeling groundwater dynamics in shallow water table areas [J]. Journal of Hydrology, 2012,412:170−181.

[81] Seo H S, Simunek J, Poeter E P. Documentation of the HYDRUS package for MODFLOW−2000, the US Geological Survey modular ground−water model [R]. Golden, CO: IGWMC − International Ground Water Modeling Center, 2007.

[82] Morway E D, Niswonger R G, Langevin C D, et al. Modeling variably saturated subsurface solute transport with MODFLOW−UZF and MT3DMS [J]. Groundwater, 2013,51(2):237−251.

[83] Twarakavi N K C, Šimůnek J, Seo S. Evaluating interactions between groundwater and vadose zone using the HYDRUS−based flow package for MODFLOW [J]. Vadose Zone Journal, 2008,7(2):757−768.

[84] Samuel A, Blin N, Muñoz J F, et al. An unsaturated/saturated coupled hydrogeological model for the Llamara salt flat, Chile, to investigate Prosopis tamarugo survival [J]. Geosciences, 2019,10(1):1.

[85] Lyu S, Chen W, Wen X, et al. Integration of HYDRUS−1D and MODFLOW for evaluating the dynamics of salts and nitrogen in groundwater under long−term reclaimed water irrigation [J]. Irrigation Science, 2019,37(1):35−47.

[86] Freeze R A, Harlan R L. Blueprint for a physically based, digitally simulated hydrologic response model [J]. Journal of Hydrology, 1969,9(3):237−258.

[87] Beegum S, Šimůnek J, Szymkiewicz A, et al. Implementation of solute transport in the vadose zone into the HYDRUS package for MODFLOW [J]. Groundwater, 2019,57(3):392−408.

[88] Refsgaard J C, Storm B. Computer models of watershed hydrology [M]. Highlands Ranch, CO: Water Resources Publications, 2012:563−594.

[89] Brunner P, Simmons C T. HydroGeoSphere: a fully integrated, physically based hydrological model [J]. Groundwater, 2012,50(2):170−176.

[90] Provost A M, Voss C I. SUTRA, a model for saturated − unsaturated, variable−density groundwater flow with solute or energy transport: documentation of generalized boundary conditions and lake capability [R]. US Geological Survey, 2019.

[91] Bailey R T, Morway E D, Niswonger R G, et al. Modeling variably saturated multispecies reactive groundwater solute transport with MODFLOW−UZF and RT3D [J]. Groundwater, 2013,51(5):752−761.

[92] Šimůnek J, Jacques D, Langergraber G, et al. Numerical modeling of contaminant transport using HYDRUS and its specialized modules [J]. Journal of the Indian Institute of Science, 2013,93(2):265−284.

[93] Prommer H, Barry D A, Zheng C. MODFLOW/MT3DMS−based reactive multicomponent transport modeling [J]. Groundwater, 2003,41(2):247−257.

[94] Molina−Navarro E, Bailey R T, Andersen H E, et al. Comparison of abstraction scenarios simulated by SWAT and SWAT−MODFLOW [J]. Hydrological Sciences Journal, 2019,64(4):434−454.

[95] Beegum S, Vanderborght J, Šimůnek J, et al. Investigating atrazine concentrations in the Zwischenscholle aquifer using MODFLOW with the HYDRUS−1D package and MT3DMS [J]. Water, 2020,12(4):1019.

[96] Graham D N, Butts M B, Singh V P, et al. Watershed models [M] // Flexible, Integrated Watershed Modelling with MIKE SHE. Boca Raton: CRC Press, 2005:245−272.

[97] Rebelo A J, Holden P B, Hallowes J, et al. The hydrological impacts of restoration: a modelling study of alien tree clearing in four mountain catchments in South Africa [J]. Journal of Hydrology, 2022,610:127771.

[98] Therrien R, Sudicky E A. Three−dimensional analysis of variably saturated flow and solute transport in discretely fractured porous media [J]. Journal of Contaminant Hydrology, 1996,23(1/2):1−44.

[99] Kumar S K, Rammohan V, Sahayam J D, et al. Assessment of groundwater quality and hydrogeochemistry of Manimuktha River basin, Tamil Nadu, India [J]. Environmental Monitoring and Assessment, 2009,159(1−4):341−351.

[100] Jordan M I, Mitchell T M. Machine learning: trends, perspectives, and

prospects [J]. Science, 2015,349(6245):255−260.

[101]Shen C, Appling A P, Gentine P, et al. Differentiable modelling to unify machine learning and physical models for geosciences [J]. Nature Reviews Earth & Environment, 2023,4(8):552−567.

[102]Demissie Y K, Valocchi A J, Minsker B S, et al. Integrating a calibrated groundwater flow model with error−correcting data−driven models to improve predictions [J]. Journal of Hydrology, 2009, 364(3):257−271.

[103]Su Y S, Ni C F, Li W C, et al. Applying deep learning algorithms to enhance simulations of large−scale groundwater flow in IoTs [J]. Applied Soft Computing, 2020,92:106298.

[104]Yu X, Cui T, Sreekanth J, et al. Deep learning emulators for groundwater contaminant transport modelling [J]. Journal of Hydrology, 2020,590:125351.

[105]Chen C, Zhang H, Shi W, et al. A novel paradigm for integrating physics−based numerical and machine learning models: a case study of eco−hydrological model [J]. Environmental Modelling & Software, 2023,163:105669.

[106]Wang C, Jiang S, Zheng Y, et al. Distributed hydrological modeling with physics−encoded deep learning: a general framework and its application in the Amazon [J]. Water Resources Research, 2024,60(4): e2023WR036170.

[107]Adombi A V D P, Chesnaux R, Boucher M A. Comparing numerical modelling, traditional machine learning and theory−guided machine learning in inverse modeling of groundwater dynamics: a first study case application [J]. Journal of Hydrology, 2022,615:128600.

[108]廖建华,周军英,程 燕,等.农药旱地作物—地表水风险评估暴露场景研究进展 [J]. 生态与农村环境学报, 2017,33(4):1−8.
Liao J H, Zhou J Y, Cheng Y, et al. Research progress on exposure scenarios for surface water risk assessment of pesticides used in dryland crops [J]. Journal of Ecology and Rural Environment, 2017, 33(4):1−8.

[109]廖建华.旱地使用农药地表水暴露评估技术研究 [D]. 南京:南京信息工程大学, 2017.
Liao J H. Research on surface water exposure assessment technology of pesticides used in dryland agriculture [D]. Nanjing: Nanjing University of Information Science and Technology, 2017.

[110]文伯健,李文娟.China−PEARL 和 PRZM−GW 模型潍坊市场景农药地下水风险评估研究 [J]. 农业资源与环境学报, 2014,(5):401−410.
Wen B J, Li W J. Groundwater risk assessment of pesticides under Weifang scenario using China−PEARL and PRZM−GW models [J]. Journal of Agricultural Resources and Environment, 2014,(5):401−410.

[111]毛连纲,周艳明,张 兰,等.基于 TOP−RICE 模型嘧菌酯•噻呋酰胺 4%展膜油剂稻田水溢出对水生生态系统风险评估研究 [J]. 生态毒理学报, 2017,12(4):153−163.
Mao L G, Zhou Y M, Zhang L, et al. Aquatic ecological risk assessment of paddy water overflow of 4% azoxystrobin•thifluzamide spreading oil formulation based on the TOP−RICE model [J]. Asian Journal of Ecotoxicology, 2017,12(4):153−163.

[112]王清扬,郭雨涵,吴 婧.依托环境影响评价制度从源头加强新污染物管控 [J]. 环境保护, 2023,51(7):18−23.
Wang Q Y, Guo Y H, Wu J. Strengthening source control of emerging contaminants relying on the environmental impact assessment system [J]. Environmental Protection, 2023,51(7):18−23.

[113]解怀君,刘昱宏,闫振辉,等.陆海统筹背景下的新污染物环境多介质空间分异模型 [J]. 海洋环境科学, 2024,43(4):1−10.
Xie H J, Liu Y H, Yan Z H, et al. Multimedium spatial differentiation model of emerging contaminants under land‐sea coordination [J]. Marine Environmental Science, 2024,43(4):1−10.

[114]Harris S M, Jin Y, Loch−Caruso R, et al. Toxicants associated with spontaneous abortion in the comparative toxicogenomics database (CTD) [A]. bioRxiv, 2019:755868.

[115]Dooley E E. EHPnet: Collaborative on health and the environment toxicant and disease database [J]. Environmental Health Perspectives, 2006,114(9):A523.

[116]吴爱明,赵晓丽,冯 宇,等.美国生态毒理数据库(ECOTOX)对中国数据库构建的启示 [J]. 环境科学研究, 2017,30(4):636−644.
Wu A M, Zhao X L, Feng Y, et al. Implications of the US ecological toxicology database (ECOTOX) for database construction in China [J]. Research of Environmental Sciences, 2017,30(4):636−644.

[117]温宥越,于云江,孙 强,等.我国污染物健康风险毒性数据库构建研究 [J]. 环境科学研究, 2022,35(11):2608−2617.
Wen Y Y, Yu Y J, Sun Q, et al. Construction of toxicity database for health risk assessment of pollutants in China [J]. Research of Environmental Sciences, 2022,35(11):2608−2617.

[118]董书衡,张心悦,魏兰馨,等.国内外农药相关数据库建设现状分析 [J]. 环境与职业医学, 2020,37(12):1211−1218.
Dong S H, Zhang X Y, Wei L X, et al. Status of pesticide−related database construction at home and abroad [J]. Journal of Environmental and Occupational Medicine, 2020,37(12):1211−1218.

作者简介：顾璐瑶(1997−),女,江苏无锡人,助理研究员,硕士,主要从事新污染物筛查与风险评估研究.发表论文 5 篇.guluyao@nies.org.