

新污染物环境归趋模拟研究的文献计量学分析

商美琪^{1,2}, 董建玮¹, 谢 晖²

(1. 南京师范大学海洋科学与工程学院, 海-陆环境演变与生态建设省高校重点实验室, 江苏 南京 210023)

(2. 中国科学院南京地理与湖泊研究所, 湖泊与流域水安全全国重点实验室, 江苏 南京 211135)

[摘要] 新污染物因来源广泛、环境行为复杂及潜在高风险, 已成为全球环境科学研究的前沿热点, 环境归趋模拟是揭示其环境行为与生态风险的重要方法。本研究基于 2001—2025 年 Web of Science 核心合集数据库中的相关文献, 采用 CiteSpace 与 VOSviewer 两种文献计量与可视化分析工具, 对新污染物环境归趋模拟研究进行了系统梳理。结果表明: 该领域经历了起步、稳步发展与快速增长 3 个阶段, 中国在发文数量与国际合作中均处于主导地位; 研究主题主要集中于新污染物环境归趋建模、环境行为驱动因素、污染源识别与模拟分析、气候变化影响及风险评估方向; 研究热点逐步由宏观归趋分析向微观机制解析与区域风险评估转变, 并形成以物理模型、化学模型、生物模型、统计模型和综合模型为主的多元建模体系。未来研究应加强多尺度、多介质与多过程模型的耦合集成, 以提升复杂环境系统中新污染物归趋行为的预测能力, 并为构建全球适用的风险管控框架与政策制定提供坚实支撑。相较以往多侧重于新污染物环境赋存与管理的综述, 本文聚焦于环境归趋模拟方法, 系统量化梳理了该领域的知识结构与演化趋势, 突出了模拟研究在新污染物研究方法体系与实际应用中的关键作用。

[关键词] 新污染物, 环境归趋, 建模方法, 文献计量, 趋势演变

[中图分类号] X592 **[文献标志码]** A **[文章编号]** 1001-4616(2026)02-0120-12

Bibliometric Analysis of Research on Environmental Fate Modeling of Emerging Contaminants

Shang Meiqi^{1,2}, Dong Jianwei¹, Xie Hui²

(1. School of Marine Science and Engineering, Nanjing Normal University, Jiangsu Key Laboratory of Ocean-Land Environmental Change and Ecological Construction, Nanjing 210023, China)

(2. State Key Laboratory of Lake and Watershed Science for Water Security, Nanjing Institute of Geography and Limnology, Chinese Academy of Sciences, Nanjing 211135, China)

Abstract: Emerging contaminants, characterized by diverse sources, complex environmental behaviors, and potential high risks, have become a major focus in environmental science worldwide. Environmental fate modeling is a key approach for understanding their behavior and ecological risks. Using publications from 2001 to 2025 in the Web of Science core collection, this study applies CiteSpace and VOSviewer to conduct a systematic bibliometric and visualization analysis of research on the environmental fate modeling of emerging contaminants. The analysis shows that: The development of the field can be categorized into 3 distinct phases, including an initial stage, steady growth, and rapid expansion. China ranks first in both the number of publications and international collaborations. The research topics primarily focus on environmental fate modeling of emerging contaminants, the driving factors influencing their environmental behavior, source identification and simulation approaches, the impacts of climate change, and risk assessment. Research on emerging contaminants has progressively shifted from large-scale fate analysis to detailed investigations of underlying mechanisms and region-specific risk assessment. This shift has resulted in a modeling framework that combines physical, chemical, biological, statistical, and integrated models. Future work needs to advance the integration of multi-scale, multi-media, and multi-process models to improve predictive capacity in complex environmental systems and to support risk management frameworks and policy development at the global level. Distinct from previous reviews that primarily emphasize contaminant

收稿日期: 2025-08-15.

基金项目: 江苏省高等学校基础科学(自然科学)研究面上项目(24KJB610009)、江苏省研究生科研与实践创新计划项目(KYCX25_1990)、国家自然科学基金项目(42577069, 51809177).

通讯作者: 董建玮, 副教授, 研究方向: 污染物源迁汇过程与机制研究. E-mail: jwdong@nnu.edu.cn

occurrence and management, this study highlights environmental fate modeling, offering a systematic quantitative synthesis of the field's knowledge structure and evolution, and underscoring the methodological and applied contributions of modeling research in emerging contaminant studies.

Key words: emerging contaminants, environmental fate, modeling approaches, bibliometric analysis, trend evolution

新污染物是指排放到环境中的,具有生物毒性、环境持久性、生物累积性等特征,对生态环境或人体健康存在较大风险,但尚未纳入管理或现有管理措施不足的有毒有害化学物质。国内外广泛关注的主要有抗生素^[1]、激素^[2]、个人药品与护理品^[3]、部分持久性有机污染物(如全氟或多氟烷基化合物^[4])及微塑料^[5]等,这类污染物来源广泛、环境行为复杂,部分物质兼具持久性、生物蓄积性和高毒性^[6-8],给环境治理带来严峻挑战。

在应对这类复杂污染问题的过程中,传统监测手段因布点有限和频次不足,难以全面解析新污染物在环境中的归趋^[9]。模拟研究以其预测能力强、情景分析灵活等优势,已成为揭示新污染物环境归趋过程、行为机制及其潜在风险的重要工具^[10],并衍生出多种模拟方法,如多介质逸度模型^[11]、吸附等温线模型^[12]、生物积累模型^[13-14]等。近年来,机器学习方法也被引入新污染物建模中,用以提升模型的预测精度及对复杂环境变量的适应能力^[15-16]。新污染物环境归趋模拟领域的研究手段日益多元,但目前仍缺乏系统性的梳理与归纳,对该领域的研究现状和发展脉络尚未形成清晰的认识。

文献计量与可视化技术作为构建知识图谱的重要手段,能够从宏观层面揭示研究领域的发展脉络,可以弥补传统综述研究在客观性与系统性上的不足^[17-19]。这类方法尤其适用于学科交叉且发展迅速的领域,能协助研究者了解学科动态、发现潜在研究焦点,并衡量科研成果的价值与影响^[20]。目前,关于新污染物环境归趋的文献计量研究多集中于污染水平、环境行为和治理策略^[21-24]。虽然这些研究中也涉及新污染物的研究方法,但在对环境归趋模拟这一关键方法的系统性梳理方面仍显不足。基于此,本文以 Web of Science 核心合集数据库为数据来源,选取 2001—2025 年相关文献,借助 CiteSpace 与 VOSviewer 两款可视化工具,结合机构合作、关键词聚类、文献共被引和关键词突现等方法,在长时间尺度上梳理污染物环境归趋模拟研究领域的发展演化,揭示该领域的研究格局、前沿热点与潜在空白,为后续新污染物研究和治理政策制定提供参考。

1 材料与方法

1.1 数据来源

本研究选取 Web of Science(WOS)核心合集数据库作为数据来源,以确保文献的学术质量与国际可比性。鉴于 CNKI(China National Knowledge Infrastructure)收录的相关文献数量有限,且 Scopus 与 WOS 的覆盖范围高度重叠,继续引入其他数据库的必要性不大。该策略虽能保证整体趋势判断的可靠性,但也存在局限:其一,未能覆盖部分中文权威期刊与会议论文,可能低估区域性成果;其二,会议论文往往承载前沿探索,排除后或在一定程度上削弱研究的时效性。总体而言,这些不足对宏观趋势的判断影响有限,因此本研究仅依托 WOS 核心合集开展分析。

本研究采用高级检索对 WOS 数据库进行检索,检索式:TS = ((“emerging contaminant *” OR “antibiotic *” OR “Persistent Organic Pollutants” OR “Microplastics” OR “Pharmaceuticals and Personal Care Products” OR “Per- and Polyfluoroalkyl Substances” OR “Endocrine-Disrupting Chemicals”) AND (“model *” OR “simulation”)). 检索限定条件:语种为 English,文献类型为 Article,时间范围为 2001 年至今。同时,人工剔除重复发表及与新污染物环境归趋模拟不相关的文章以及非学术性文章,最终纳入 1116 篇有效文献。

1.2 分析方法

本研究采用 CiteSpace 6.3 R1 与 VOSviewer 1.6.20 软件对相关文献进行知识图谱分析,分析时间范围设定为 2001—2025 年,时间切片为 1 年。CiteSpace 能够通过生成可视化图谱揭示科学文献的发展脉络,适用于追踪研究领域主流主题的演化趋势及识别关键文献。本文利用 CiteSpace 提取高频关键词、进行关键词突现分析,并结合文献共被引分析对研究主题进行聚类划分。VOSviewer 在构建和可视化文献计量网

络方面优势显著. 基于该软件,本文绘制了发文机构合作网络图以揭示学术合作格局与研究力量分布,并通过关键词聚类网络分析识别研究热点,进而理解相关领域的知识结构.

发文数量与国家的中介中心性共同反映了一国在特定研究领域的科研实力与影响力. 其中,中介中心性衡量该国在国际科研合作网络中连接其他国家的枢纽能力,其值越高,表明该国在全球学术合作中越活跃. 研究机构合作网络分析有助于识别核心研究机构,揭示领域内的合作模式与发展趋势. 图中节点大小代表机构在合作网络中的连接度,节点越大,表示该机构的合作连接越广泛. 领域的研究主题通过关键词频率分析以及关键词聚类等方法进行识别. 当两篇文献同时被同一篇施引文献引用时,即构成文献共被引关系^[20]. 基于文献共被引网络的聚类分析与关键词突现分析有助于揭示研究领域的演化路径与发展趋势.

2 结果与分析

2.1 文献发表趋势分析

2000—2025 年,新污染物模拟研究的论文发表数量总体呈持续增长态势(图 1),可大致分为 3 个阶段:2000—2010 年为起步探索期,发文量增长缓慢,但国际社会对新污染物的关注逐渐升温. 2001 年我国国家高技术研究发展计划(“863 计划”)启动了“环境内分泌干扰物的筛选与控制技术”项目,标志着国内相关研究的正式起步^[25];直至 2009 年 PFOS(全氟辛烷磺酸)被纳入《斯德哥尔摩公约》,新污染物环境问题开始受到全球范围的广泛关注. 2011—2017 年为稳步发展期,这一阶段新污染物问题逐渐进入政策议程,推动了研究的持续深入,例如 2010 年中国卫生部明确提出消毒类产品中禁止使用抗生素和激素,欧盟与联合国也陆续发布针对环境内分泌干扰物、全氟化合物、微塑料和抗生素的限制性法规. 2018—2025 年进入快速增长期,论文发表数量显著增多并在 2022 年前后达到高峰,这与新污染物被提升为全球环境治理议题密切相关. 2017 年我国启动近岸海域微塑料污染系统调查,同年欧盟发布了“塑料战略”,规定授予欧盟生态标签的洗涤剂不得含有塑料微珠,法国、英国、加拿大分别规定禁止销售含塑料微珠的洗护产品. 2018 年,美国修订《包装中的有毒物质法》,禁止在食品包装中使用全氟化合物 PFAS. 2020 年我国生态环境部将 PFOA(全氟辛酸)列入《优先控制化学品名录》,同年欧盟食品安全局对全氟化合物的摄入量发布规定,要求总量不超过 4.4 ng/kg. 一系列政策举措在强化管理的同时也极大推动了研究的深入开展. 总体而言,新污染物模拟研究近年来日益受到重视,其发展轨迹与国内外环境管理政策的演进密切相关.

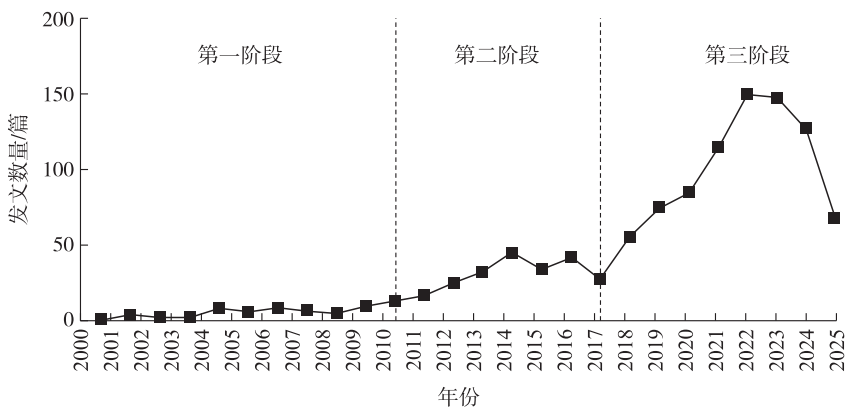


图 1 文献年度发文量走势图(2000—2025 年)

Fig. 1 Trend of annual scientific publications(2000–2025)

新污染物环境归趋模拟研究领域的发文量呈现明显的区域集中趋势(图 1、表 1). 2000—2025 年,中国以 470 篇的发文量位居全球首位,占总发文量的 40.48%. 其中介中心性达 0.32,表明中国不仅是该领域研究的核心力量,也是国际合作网络的关键枢纽. 美国以 187 篇的发文量(占总发文量的 16.11%)位居第二,其中介中心性为 0.16,印证其研究影响力与国际协作能力. 欧洲国家整体表现出较强的科研实力,德国、英国、法国等参与度较高,其中德国的中介中心性为 0.29,这与其在水文与环境模拟模型的研发与应用方面具有深厚积累的密切相关,这些模型为新污染物模拟研究提供了有力支撑. 值得注意的是,西班牙、

荷兰等国家虽发文量相对较少,但其中介中心性指标表明它们在合作网络中的地位同样重要. 尤其是荷兰在水环境模拟研究方面具有学术优势,例如 Delft3D 模型的研发与广泛应用,使其成为连接不同国家研究团队和新污染物模拟研究方向的重要纽带. 总体而言,该领域已形成以中国为主导、欧美国家共同推动的国际研究格局.

表 1 发文量前 10 名的国家
Table 1 Top 10 countries in terms of number of publications

排名	国家	发文量	中介中心性	总发文量占比	排名	国家	发文量	中介中心性	总发文量占比
1	中国	470	0.32	40.48%	6	法国	50	0.24	4.31%
2	美国	187	0.16	16.11%	7	西班牙	46	0.09	3.96%
3	德国	84	0.29	7.24%	8	瑞典	40	0.04	3.45%
4	加拿大	75	0.01	6.46%	9	荷兰	40	0.08	3.45%
5	英国	65	0.17	5.60%	10	意大利	38	0.07	3.27%

2.2 合作网络分析

图 2 展示了该领域研究机构间的合作网络,节点颜色变化表明科研合作强度随时间推移而逐渐增强. 分阶段来看,2014—2018 年活跃节点主要集中在欧洲机构,如捷克的马萨里克大学 (Masaryk University) 和德国的马普气象研究所 (Max Planck Institute for Meteorology),显示出欧洲在早期研究中的先导作用. 2018 年以后,中国科研机构在合作网络中的连接显著增加. 中国科学院 (Chinese Acad Science) 处于核心枢纽地位,与北京师范大学 (Beijing Normal University)、浙江大学 (Zhejiang University)、北京大学 (Peking University) 等国内高校形成了紧密合作网络,表明中国已在该领域构建起相对完整的研究体系. 此外,中国的科研机构与全球多国大学及研究机构建立了广泛合作关系,凸显了中国在该领域的崛起与国际化趋势.

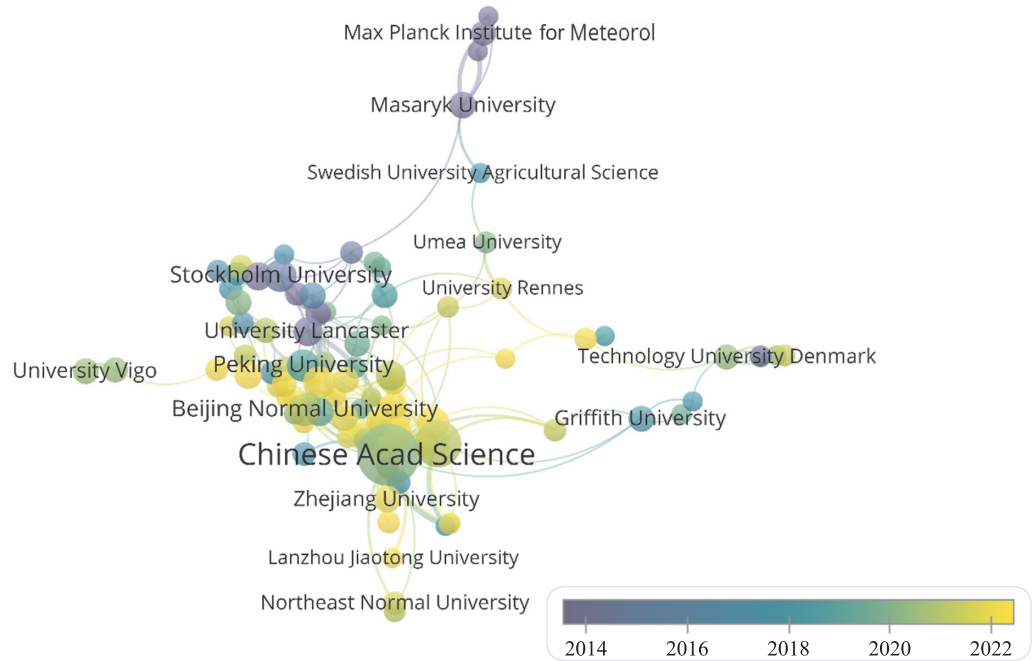


图 2 研究机构合作图谱
Fig. 2 Research institution collaboration network

在机构合作格局的基础上,进一步考察作者合作网络,可以识别领域内的核心学者及其合作关系(图 3). 结果显示,Martin Scheringer、Matthew Macleod、Konrad Hungerbuehler、James M. Armitage 和 Ian T. Cousins 构成了国际核心团队,合作紧密,在关于污染物暴露与环境分布的数学和概念模型研究方面具有重要影响. 中国学者中,Jianmin Ma(马建民)、Gan Zhang(张干)、Jun Li(李军)等形成合作群体,研究重点多集中于区域污染特征与归趋模拟;Guangguo Ying(应光国)、Yousheng Liu(刘有胜)、Qianqian Zhang(张芊芊)等被识别为合作群体,其研究聚焦于新污染物在环境中的迁移与归趋模拟,并结合风险评价揭示其潜在环境

效应. 整体来看,国际团队在方法与模型方面具有优势,中国学者在区域应用研究中积累了丰富经验,加强跨团队合作有助于推动该领域进一步发展.

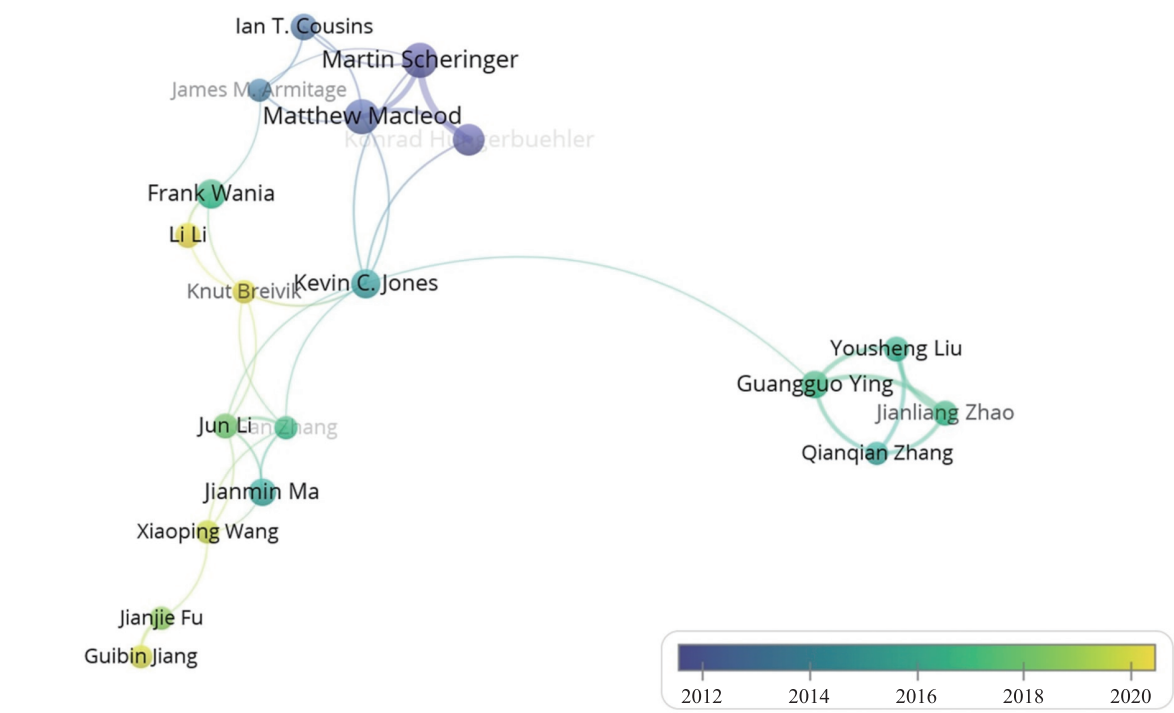


图 3 作者合作图谱
Fig. 3 Author collaboration network

2.3 研究主题聚类分析

关键词共现聚类图(图 4)展示了新污染物环境归趋模拟研究的主要研究方向与知识结构. 图中不同颜色代表不同的聚类,每一类聚焦于相对独立的研究主题,关键词间的连线表示其在文献中的共现关系. 绿色聚类主要聚焦于新污染物的迁移归趋与建模分析,其关键节点包括 PPCPs(药品及个人护理品)、

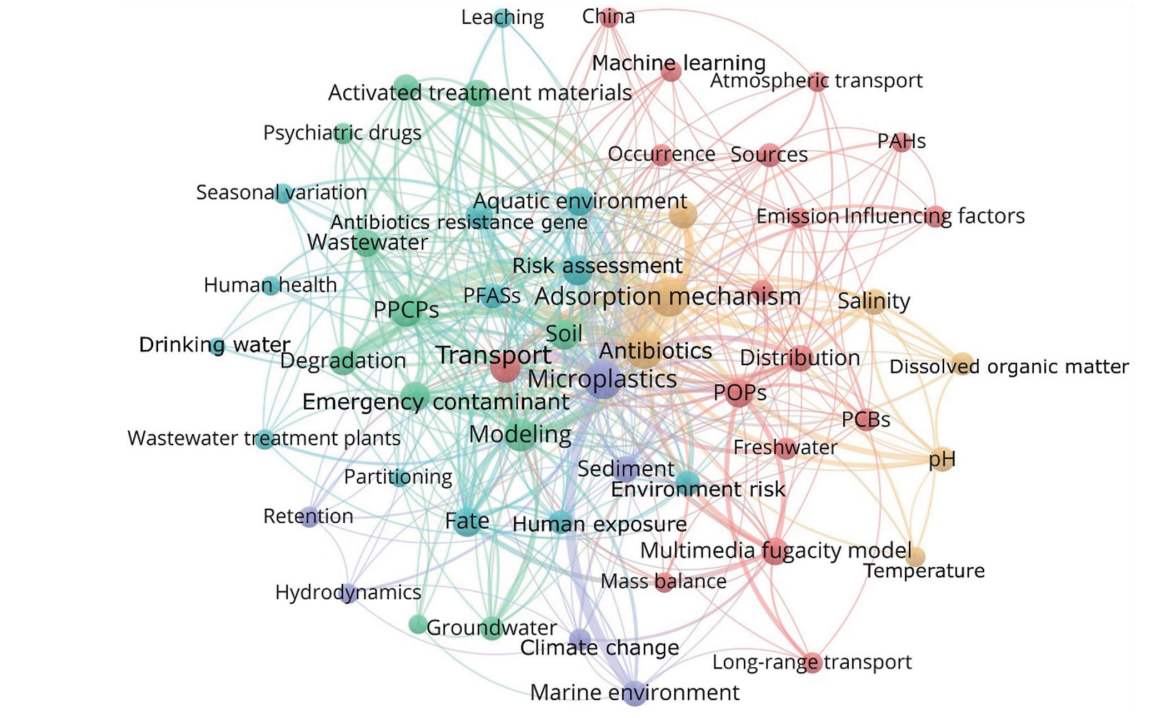


图 4 关键词共被引聚类分析
Fig. 4 Keyword co-occurrence cluster analysis

Degradation(降解)、Modeling(模拟)、Soil(土壤)和 Wastewater(废水)等,表明研究者重点关注个人药品类污染物在环境相的赋存状态,并借助模型构建进行环境行为模拟. 橙色聚类对应于环境因子对新污染物环境行为的影响机制研究. 关键词如 Adsorption mechanism(吸附机制)、pH(酸碱度)、Salinity(盐度)、Dissolved organic matter(溶解性有机质)等,强调了环境理化条件对污染物分布和行为的调控作用. 红色聚类代表污染物来源识别与环境归趋模型方法. 核心关键词包括 POPs(持久性有机污染物, Persistent organic pollutants)、Transport(迁移)、Sources(来源)、Multimedia fugacity model(多介质逸度模型)和 Machine learning(机器学习)等. 在新污染物源解析和迁移路径预测研究中,不仅涉及多介质逸度模型等环境归趋模型,以机器学习为代表的新方法也受到关注. 紫色聚类聚焦于气候变化与海洋环境下的新污染物行为,包含 Microplastics(微塑料)、Marine environment(海洋环境)、Climate change(气候变化)、Hydrodynamics(水动力)等关键词. 这反映了在全球变化背景下,研究者对海洋环境中微塑料污染问题的关注度不断提升. 蓝色聚类则围绕新污染物的环境风险与风险评估展开,关键词如 PFASs(全氟或多氟烷基化合物)、Aquatic environment(水生环境)、Fate(归趋)、Risk assessment(风险评估)和 Human health(人体健康)等. 新污染物对水生生态环境和人体健康带来的长期潜在风险,仍是领域研究的核心关注点之一.

2.4 研究热点分析

高频关键词的统计结果进一步展示了当前新污染物环境归趋模拟研究领域的重点(表2). 从关键词频次来看,Fate(归趋)、Transport(迁移)、Environment(环境)等词出现频次均超过150次,凸显了新污染物在环境介质中迁移归趋过程的核心地位. 值得注意的是,Adsorption(吸附,中心性0.18)、Sorption(吸附作用,中心性0.16)和 Sediment(沉积物,中心性0.15)等关键词虽频次不高,却具有较高的中介中心性,表明其在连接不同研究子领域中起到桥梁作用. 同时, Persistent organic pollutants(持久性有机污染物)、Pharmaceuticals(药品)、Antibiotics(抗生素)、Microplastics(微塑料)等新污染物类型频繁出现,反映出研究热点集中于与人类活动密切相关的新污染物. 关键词如 Removal(去除)、Degradation(降解)和 Accumulation(累积)的高频出现,也体现了研究者对新污染物控制策略的高度关注.

表2 高频关键词

Table 2 High frequency keywords

关键词	频次	中心性	关键词	频次	中心性
Fate	233	0.2	Antibiotics	95	0.07
Environment	180	0.28	Adsorption	93	0.18
Transport	164	0.26	Pollution	91	0.07
Persistent organic pollutants	144	0.26	Removal	89	0.02
Water	139	0.07	Degradation	75	0.08
Sorption	134	0.16	Sediments	70	0.15
Pharmaceuticals	123	0.1	Risk assessment	67	0.05
Wastewater	119	0.03	Accumulation	66	0.03
Aquatic Environment	103	0.05	Microplastics	60	0.02
Marine environment	98	0.05	Personal care products	54	0.01

2.5 研究演化路径分析

文献共被引聚类时间线分析清晰地勾勒出新污染物环境归趋模拟研究知识基础的演化路径. 聚类图谱的 Q 值(0.733)表明网络结构显著,各主题轮廓值(Silhouette)均高于0.7(范围0.876~0.979),说明研究主题明确且聚类间差异显著. 基于聚类分析结果,新污染物环境归趋建模的研究主题随时间演变可归纳为5类(图5). 通过对各聚类簇内共被引文献的系统梳理,表3归纳了对应的研究主题,并提炼出具有代表性的高频共被引文献. 这些文献作为该领域的知识基础,在所选文献集中被高频共引,反映了不同阶段研究的关注重点与演化路径.

Cluster #5(Environmental chemical)是该领域最早出现的聚类,研究主题主要关注新污染物在环境介质中的物理化学行为及其吸附建模,代表了环境归趋模拟研究的理论起点. 该聚类的核心共被引文献多发表于1990年代末至2000年代初,如Beyer等^[26]和Bennett等^[27],分别从温度变化影响和区域输送特征建模角度出发,奠定了新污染物迁移归趋模拟的基础理论框架. 尽管这些文献的发表时间早于本研究文

献检索的起始年份,但在 2001 年以后发表的相关研究中被频繁共引,可被视为该领域理论发展的基础. Cluster #4(Plant uptake)聚焦于新污染物在植物体中的吸收与环境中的迁移,研究活跃期主要集中在 2000 年代初至 2010 年前后,反映出学界早期对新污染物在生物体系中迁移、积累及其生态风险的关注. 代表研究如 Forni 等^[28]和 Boxall 等^[29]分别探讨了植物对抗生素的吸收能力以及兽药在土壤环境中的迁移与暴露行为. Cluster #3(Environment fate modeling)的研究主题为新污染物迁移归趋过程的模拟与预测,研究时间跨度最长,活跃期为 2005—2015 年,标志着该领域模拟方法快速发展的关键阶段. 如 Lamon 等^[30]采用多介质归趋模型 BETR Global(Berkeley-Trent Global Multimedia Fate Model)对多氯联苯的全球迁移进行了情景模拟. 尽管其研究对象为传统持久性有机污染物,但所采用的模型方法与区域耦合策略为新污染物归趋模拟研究提供了重要参考. Cluster #2(Adsorption)代表新污染物在环境介质中吸附行为及其作用机制的研究. 该聚类形成时间相对较晚,研究活跃期主要集中在 2015 年之后. 核心文献如 Wang 等^[31]与 Liu 等^[32]深入探讨了吸附过程的微观机制,反映出研究视角由宏观的环境归趋模拟逐渐转向对吸附行为等微观机理的探索. Cluster #1(Atmospheric microplastics)是目前最活跃且最新的研究聚类,聚焦于新污染物如微塑料在大气环境中的迁移与沉降行为. 代表性研究如 Allen 等^[33]和 Brahney 等^[34],探讨了微塑料在大气介质中的输送机制及其潜在健康风险,标志着新污染物研究正向多介质交互的复杂环境系统深化并向区域-全球联动维度扩展.

5 个聚类主题反映了新污染物环境归趋建模研究由物理建模向机制解析的演化趋势. 早期以持久性有机污染物为核心的宏观建模奠定了理论与方法基础. 多介质归趋模型与区域耦合模拟最初用于持久性有机污染物的大气迁移与全球输送,随后被改进并应用于全氟化合物、抗生素等新污染物的环境归趋研究. 有关新污染物在环境介质中理化行为及吸附特征的研究,则为模型参数化和机理解析提供了支撑,有助于提升模拟精度. 在这一过程中,政策管控措施的出台推动了研究对象的转变,而早期研究形成的方法学框架也在不同新污染物归趋模拟中得到完善.

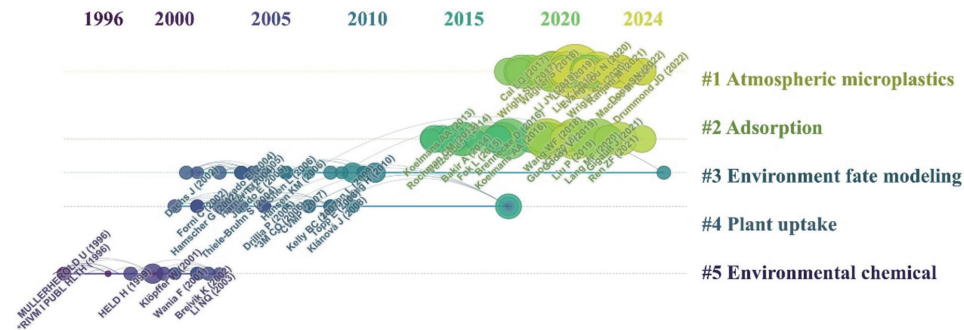


图 5 文献共被引聚类时间线
Fig. 5 Timeline of co-citation clusters

表 3 文献共被引聚类汇总表

Table 3 Summary table of co-citation clusters

编号	聚类关键词	聚类主题	聚类大小	轮廓系数	核心文献
1	Atmospheric microplastics	微塑料在大气中的环境归趋研究	47	0.876	[33–34]
2	Adsorption	新污染物吸附行为与机制研究	32	0.878	[31–32]
3	Environment fate modeling	新污染物迁移归趋模型研究	22	0.944	[30,35]
4	Plant uptake	新污染物在植物体中吸收与环境中的迁移研究	20	0.950	[28–29]
5	Environmental chemical	新污染物在环境介质中的化学行为与吸附建模研究	17	0.979	[26–27]

2.6 研究发展趋势分析

基于关键词突现分析(图 6),新污染物环境归趋模拟研究领域的发展可分为 3 个阶段:早期(2001—2010 年)突现的关键词以 Air(大气)、Persistent organic pollutants(持久性有机污染物)、Polychlorinated biphenyls(多氯联苯)为主,研究重点在于典型污染物在大气等介质中的迁移扩散,研究方法以宏观尺度建模为主. 这一时期与国际社会对 POPs 管控的关注相呼应,例如 2000 年 3M 公司停止生产全氟化合物,2009 年 PFOS 被纳入《斯德哥尔摩公约》,推动了相关研究的兴起. 进入 2010 年代,突现关键词转向

Endocrine disrupting chemicals(内分泌干扰物)、Veterinary antibiotics(兽用抗生素)和 Aquatic environment(水生环境),研究对象扩展至与人类活动密切相关的新污染物,聚焦其在水环境中的赋存与迁移. 内分泌干扰物是我国最早纳入政策管控的新污染物类别,此外 2010 年卫生部《关于禁止消毒产品使用抗生素和激素的公告》以及 2015 年《水污染防治行动计划》,进一步推动了抗生素等新污染物的研究与治理,体现了政策对科研的推动作用. 近五年,关键词如 Antibiotic resistance genes(抗生素抗性基因)、Perfluoroalkyl substances(全氟或多氟烷基化合物)、Agricultural soils(农业土壤)、Deposition(沉降)和 China(中国)呈现显著突现,研究逐渐深入至微观行为机制、区域分布及生态风险评估. 这与 2020 年 PFOA 被纳入《优先控制化学品名录》及 2022 年《新污染物治理行动方案》的实施密切相关,后者提出完善监测评估体系、加强基础研究和源头管控,为科研提供了新的方向和政策支撑. 新污染物环境归趋建模研究呈现出由宏观赋存分析向区域分布特征、风险评估及政策应用方向转变的发展趋势.

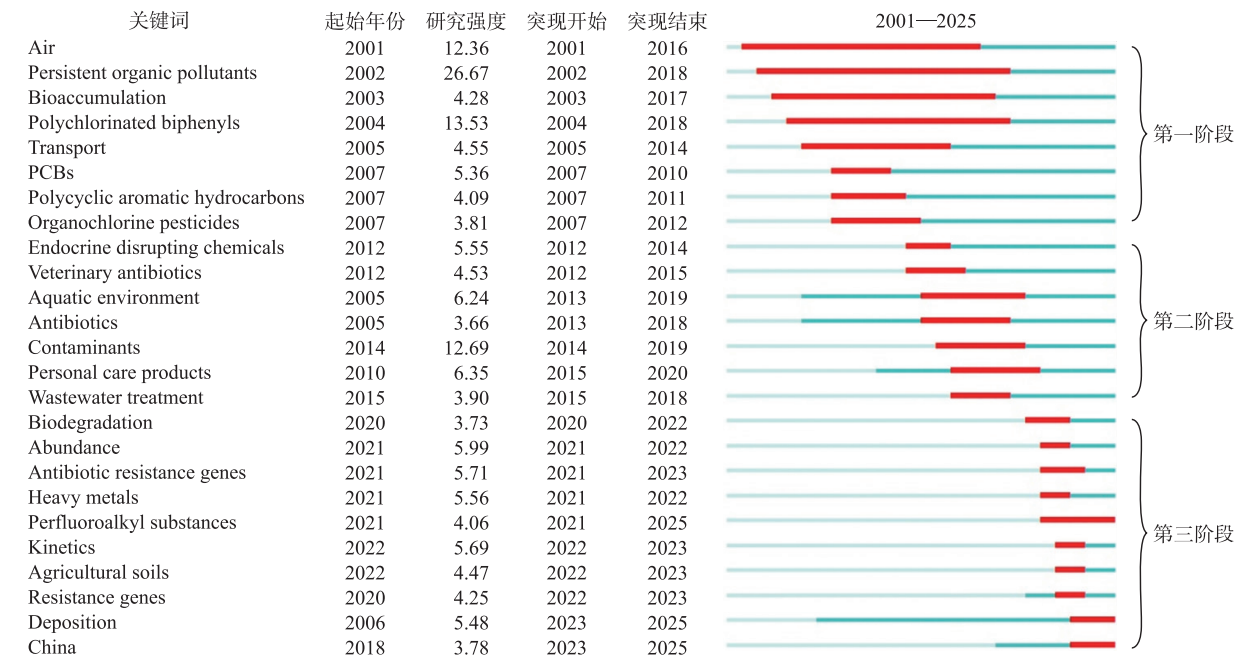


图 6 关键词突现图
Fig. 6 Keywords with the strongest citation bursts

3 讨论

3.1 建模方法分类与模型应用

环境归趋模型是研究新污染物在自然环境中迁移、转化、富集及归趋等过程的重要工具^[36]. 随着新污染物环境归趋模拟研究的深入,建模方法日益多样. 基于文献计量与代表性模型应用,可以将当前主流模型方法归纳为五大类:物理模型、化学模型、生物模型、统计模型及综合模型(表 4).

物理模型是新污染物环境归趋模拟研究中最早被广泛采用的一类模型,旨在描述污染物在水体、大气、土壤等介质中的迁移与分布过程. 例如,扩散模型、水动力模型和水质模型常被用于模拟抗生素、持久性有机污染物等在流域或近岸水体中的运输路径^[37-40]. 此类模型结构清晰、参数化过程相对简便,适用于大尺度新污染物归趋分析. 然而,由于未充分考虑污染物本身的化学性质,其在处理复杂反应过程或跨介质迁移方面仍存在局限. 化学模型则侧重于刻画污染物在环境介质中的反应动力学及其物理化学行为变化. QSAR 模型能够通过分子结构特征预测其环境行为及毒性阈值,服务于 PNEC(Predicted No Effect Concentration, 预测无效应浓度)评估与生态风险预测^[41];吸附等温线模型与反应动力学模型则能精细描述污染物在不同介质中的吸附、解吸与降解过程^[12]. 这类模型深化了对新污染物相关化学过程的理解. 随着新污染物潜在的生物毒性受到广泛关注,生物模型已被逐渐引入环境归趋研究中,能够用于模拟抗生素等新污染物在食物链及人体内的富集过程^[4,13]. 与物理模型和化学模型在预测污染物赋存与分布方面的优势不同,这类模型为健康风险评估和食物链污染预警提供重要支持. 此外,统计模型在新污染物

环境归趋研究中也得到广泛应用. 统计模型在识别关键污染因子、解析空间分布模式及揭示归趋规律中展现优势. 例如,回归模型可量化邻苯二甲酸酯类化合物在沉积物中的影响因子贡献度,而机器学习模型则能预测土壤中微塑料或药物的吸附潜力^[15,42]. 这类模型在提升建模效率方面展现出重要价值,但其可解释性不足,仍是一个挑战. 综合模型则通过整合多种建模框架,构建多介质迁移归趋模型体系. 例如,Zhang 等^[43]与 Xie 等^[44]分别采用多介质逸度模型与分布式过程模型,模拟新污染物在多环境介质间的迁移行为. 相较于单一机制模型,此类模型凭借其高度的可扩展性与实用性,能够为新污染物环境管理决策提供坚实的科学支撑.

表 4 新污染物归趋模拟研究中典型模型类型
Table 4 Model types in emergency contaminants fate studies

分类	模型名称	简要描述	文献
物理模型	扩散模型	基于反应-扩散方程模拟持久性有机污染物在沉积物中降解与扩散过程	[37]
	水动力模型	基于海洋水动力模拟持久性有机污染物的输运、沉积与季节变化	[38]
	水质模型	多介质水质模型模拟新污染物在水库中的迁移转化过程,评估其与水质因子相互作用及生态风险	[39]
	输运模型	基于一维输运模型 OTIS 模拟抗生素在溪流中的水动力迁移与衰减行为	[40]
化学模型	QSAR 模型	基于 QSAR-ICE-SSD 复合模型预测烷基酚类化合物的 PNEC 值,用于河流生态风险评估	[41]
	吸附等温线模型	采用多组分 Langmuir 模型模拟布洛芬在不同条件下的吸附机制	[12]
	化学反应模型	基于一阶衰减模型拟合雷尼替丁在土壤中的降解动力学,用于估算其 DT50 值	[45]
生物模型	生物累积模型	基于逸度框架的生物累积模型,模拟多氯联苯等脂溶性污染物通过食物链在人体中的逐级富集过程	[13]
	AQUATOX 生态系统模型	基于 AQUATOX 生态系统模型,模拟污染物对食物网生物量的影响	[4]
统计模型	机器学习模型	基于机器学习预测污染物在土壤中的吸附能力及分布	[15]
	回归模型	基于回归建模预测 PFAS 在污泥中的分配行为,并识别关键影响因子	[42]
	马尔可夫链模型	利用马尔可夫链模拟污染物在水环境中的季节性迁移与去除行为	[46]
综合模型	多介质逸度模型	基于 Level III 逸度模型模拟中国 58 个流域中抗生素的多介质迁移与环境分布特征	[43]
	多介质过程模型	利用分布式过程模型,耦合水-土-污染物过程,模拟流域尺度下抗生素的迁移归趋	[44]

3.2 环境归趋模拟的关键过程

从关键词聚类 and 热点分析来看,准确刻画新污染物的迁移与归趋过程仍是环境归趋模拟研究的核心. 新污染物在自然水体中的吸附/解吸、随泥沙沉降/再悬浮是水-沙-污染物相互作用的重要过程. 以全氟化合物为代表的新污染物兼具亲水性和疏水性,易在颗粒物和沉积物中富集,并通过沉积物再悬浮或孔隙水释放重新进入水体,引发二次污染^[47-48]. 新污染物的降解与去除也是决定其环境行为的重要因素. 在自然条件下,部分新污染物能够发生光解、水解及微生物降解^[49];而在人工条件下,则多依赖高级氧化、催化、膜分离及新型吸附材料等技术手段^[50-51]. 对这些过程的模拟不仅有助于揭示新污染物在环境中的持久性与降解特征,也为污染治理技术的优化与改进提供了理论依据.

此外,新污染物的生物富集及累积效应同样不可忽视. 全氟化合物和微塑料等典型难降解污染物易在食物链中逐级累积,从而放大新污染物这类痕量污染物对生态系统与人类健康的潜在危害^[52]. 开展生物富集过程与累积效应的模拟和量化研究,有助于提升新污染物生态风险预测与管控的科学性和有效性. 总体而言,围绕新污染物迁移归趋过程的持续研究与模拟,不仅深化了研究者们对新污染物环境行为的理解,也为未来污染治理与风险管控提供了坚实支撑.

3.3 环境模拟研究挑战与展望

- 水环境中新污染物的模拟研究在模型构建、验证以及多源污染物交互模拟方面仍面临显著挑战.
- (1)高质量的监测数据是保障模型模拟可靠性的基础. 然而,长时序数据的获取成本高昂,使得模型在边界条件设定难以精确;同时,采样方法差异与实验室检测误差也会叠加不确定性,削弱模型的预测能力. 未来可通过完善新污染物检测标准、整合多渠道观测资料,并逐步建立长期监测体系,从而提升模型参数设定的准确性与模拟结果的稳定性.
- (2)现有研究在模型评估中普遍采用纳什效率系数、均方根误差和决定系数等常用指标,但其阈值设定在不同研究中存在差异. 例如,部分研究中 NSE 大于 0.5 即可接受,而另一些则要求超过 0.7 才能满足精度要求. 此外,不同水环境类型(如河流、湖泊和地下水)对这些指标的敏感性也不尽相同,从而导致不同研究结果之间难以直接比较. 这种差异削弱了模拟结果的横向可比性,也制约了模型在多区域、多情境下的推广应用. 未来有必要建立更加统一且具针对性的评价体系,以提升模型验证的可靠性与广泛适用性.

(3)新污染物的源-迁-汇过程复杂,涉及水动力学、生态学、化学和生物学等多学科知识.单一模型往往难以全面刻画多介质、多尺度条件下的环境行为.例如,流域尺度模型适用于污染物负荷估算,但对生物-化学作用过程的刻画有限;二维或三维水质模型虽能反映污染物在水体中的时空分布与相互作用,但其对数据与计算资源的依赖极大.未来研究应发展多尺度、多介质、多过程耦合模型,以支持新污染物的全过程管控和科学决策.

4 结论

本研究基于文献计量分析,系统梳理了新污染物环境归趋模拟的研究进展.结果表明新污染物环境归趋模拟已进入快速发展期,以中国为核心的科研力量正与多国合作,该领域已成为环境科学的重要研究方向之一.研究重点涵盖迁移建模、环境因子机制、风险评估及药品、抗生素、微塑料等新污染物,研究内容由新污染物的宏观预测拓展至微观机制与多介质耦合模拟.当前领域主要建模方法多样,物理、化学、生物和统计模型各具优势,而综合模型通过整合多介质、多过程特征,在复杂环境中展现出更强的预测与应用潜力,具备良好的政策与管理价值.吸附、沉降、降解和生物富集等过程在模拟研究中发挥关键作用,但领域仍存在监测数据不足、模型评价标准不统一以及单一模型适用性有限等问题.

区别于关注单一种类新污染物或特定区域中新污染物赋存的计量研究,本文聚焦新污染物环境归趋模拟这一快速发展的研究领域,系统考察其知识结构与演化趋势,强调多过程、多介质、多尺度一体化模拟在推动该领域发展中的重要作用.研究不仅梳理了该领域的发展脉络,还展现了其在风险评估、污染治理与政策制定中的应用潜力,为新污染物全过程管控提供理论支撑,并为后续研究提供方向指引.

[参考文献]

- [1] 严岩,尤本胜,刘伟京,等.基于文献计量学的近20年水环境中抗生素污染研究趋势及热点分析[J].环境工程技术学报,2023,13(3):1161-1167.
- [2] 李晓瑞,杨黎彬,郝泽伟,等.水环境中性激素污染现状及其高级氧化控制技术研究进展[J].现代化工,2024(1):18-22.
- [3] 胡丽雅.地下水典型药品和个人护理品检测与风险评估[J].环境科学与技术,2023,46(增刊1):216-223.
- [4] Gredelj A, Barausse A, Grechi L, et al. Deriving predicted no-effect concentrations (PNECs) for emerging contaminants in the river Po, Italy, using three approaches: assessment factor, species sensitivity distribution and AQUATOX ecosystem modelling [J]. Environment International, 2018, 119: 66-78.
- [5] 刘璇,李俊,李桂杰,等.基于CiteSpace文献计量的微塑料相关进展与热点研究[J].环境科学与管理,2025(5):31-36.
- [6] Blumberg B, Iguchi T, Odematt A. Endocrine disrupting chemicals [J]. The Journal of Steroid Biochemistry and Molecular Biology, 2011, 127(1/2): 1-3.
- [7] Wang Z, Chen Q, Hu L, et al. Combined effects of binary antibiotic mixture on growth, microcystin production, and extracellular release of *Microcystis aeruginosa*: application of response surface methodology [J]. Environmental Science and Pollution Research, 2018, 25(1): 736-748.
- [8] Yan Y, Deng Y, Li W, et al. Phytoremediation of antibiotic-contaminated wastewater: insight into the comparison of ciprofloxacin absorption, migration, and transformation process at different growth stages of *E. crassipes* [J]. Chemosphere, 2021, 283: 131192.
- [9] 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(2):1-6.
- [10] 陈晓红,刘晓亮,袁依格,等.基于人工智能技术的新污染物治理策略与路径研究[J].中国工程科学,2025,27(3):152-163.
- [11] 张子慕,杨崇铭,全红梅,等.基于逸度方法的多介质环境模型的应用与展望[J].延边大学农学学报,2023,45(4):100-106.
- [12] Iovino P, Canzano S, Capasso S, et al. A modeling analysis for the assessment of ibuprofen adsorption mechanism onto activated carbons [J]. Chemical Engineering Journal, 2015, 277: 360-367.
- [13] Czub G, McLachlan M S. A food chain model to predict the levels of lipophilic organic contaminants in humans [J]. Environmental Toxicology and Chemistry, 2004, 23(10): 2356-2366.
- [14] 黄佳怡,缪爱军.毒代-毒效动力学模型在评估新污染物水生态风险中的应用研究[J].生态毒理学报,2025,20(3):93-106.

- [15] Lai X, Zhou P, Kong Y, et al. A machine learning and experimental-based model for prediction of soil sorption capacity toward phenanthrene[J]. *Environmental Research*, 2024, 244: 117898.
- [16] 雷浪. 基于机器学习的长三角示范区水体新污染物慢性生态风险评估[D]. 上海: 华东师范大学, 2024.
- [17] 曹燕, 胡双庆, 沈根祥, 等. 基于文献计量的畜禽养殖废弃物新污染物研究态势分析[J]. *农业环境科学学报*, 2021, 40(11): 2296–2304.
- [18] 祝薇, 向雪琴, 侯丽朋, 等. 基于 CiteSpace 软件的生态风险知识图谱分析[J]. *生态学报*, 2018, 38(12): 4504–4515.
- [19] Chen C. Science map: a systematic review of the literature[M]. Beijing: Journal of Data and Information Science, 2017.
- [20] 赵蓉英, 许丽敏. 文献计量学发展演进与研究前沿的知识图谱探析[J]. *中国图书馆学报*, 2010, 36(5): 60–68.
- [21] 马硕, 陈士欣, 华若婷, 等. 土壤微塑料的环境行为与生态效应: 文献计量分析[J]. *环境生态学*, 2025, 7(7): 17–26.
- [22] 李泽楷, 韩森, 秦超, 等. 土壤环境中抗生素抗性基因污染研究进展和热点分析[J]. *生态与农村环境学报*, 2024, 40(1): 11–22.
- [23] 杨延梅, 杨雯清, 刘泉利, 等. 基于文献计量的农田土壤新污染物研究进展[J]. *贵州师范大学学报(自然科学版)*, 2025, 43(4): 29–40.
- [24] 曹燕, 胡双庆, 沈根祥, 等. 基于文献计量的畜禽养殖废弃物新污染物研究态势分析[J]. *农业环境科学学报*, 2021, 40(11): 2296–2304.
- [25] 张丛林, 郑诗豪, 邹秀萍, 等. 新型污染物风险防范国际实践及其对中国的启示[J]. *中国环境管理*, 2020, 12(5): 71–78.
- [26] Beyer A, Wania F, Gouin T, et al. Temperature dependence of the characteristic travel distance[J]. *Environmental Science & Technology*, 2003, 37(4): 766–771.
- [27] Bennett D H, Mckone T E, Matthies M, et al. General formulation of characteristic travel distance for semivolatile organic chemicals in a multimedia environment[J]. *Environmental Science & Technology*, 1998, 32(24): 4023–4030.
- [28] Forni C, Cascone A, Fiori M, et al. Sulphadimethoxine and *Azolla filiculoides* Lam.: a model for drug remediation[J]. *Water Research*, 2002, 36(13): 3398–3403.
- [29] Boxall A B A, Blackwell P, Cavallo R, et al. The sorption and transport of a sulphonamide antibiotic in soil systems[J]. *Toxicology Letters*, 2002, 131(1/2): 19–28.
- [30] Lamon L, Waldow H Von, Macleod M, et al. Modeling the global levels and distribution of polychlorinated biphenyls in air under a climate change scenario[EB]. USA: American Chemical Society, 2009.
- [31] Wang F, Shih K M, Li X Y. The partition behavior of perfluorooctanesulfonate (PFOS) and perfluorooctanesulfonamide (FOSA) on microplastics[J]. *Chemosphere*, 2015, 119: 841–847.
- [32] Liu G, Zhu Z, Yang Y, et al. Sorption behavior and mechanism of hydrophilic organic chemicals to virgin and aged microplastics in freshwater and seawater[J]. *Environmental Pollution*, 2019, 246: 26–33.
- [33] Allen S, Allen D, Phoenix V R, et al. Atmospheric transport and deposition of microplastics in a remote mountain catchment[J]. *Nature Geoscience*, 2019, 12(5): 339–344.
- [34] Brahney J, Hallerud M, Heim E, et al. Plastic rain in protected areas of the United States[J]. *Science*, 2020, 368(6496): 1257–1260.
- [35] Wania F, Haugen J E, Lei Y D, et al. Temperature dependence of atmospheric concentrations of semivolatile organic compounds[J]. *Environmental Science & Technology*, 1998, 32(8): 1013–1025.
- [36] 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(6): 841–849.
- [37] Teaciu A P, Borrelli R, Zaninetta L M, et al. Passive sampling of DDT, DDE and DDD in sediments: accounting for degradation processes with reaction-diffusion modeling[J]. *Environmental Science: Processes & Impacts*, 2018, 20(1): 220–231.
- [38] O'Driscoll K, Mayer B, Ilyina T, et al. Modelling the cycling of persistent organic pollutants (POPs) in the North Sea system: Fluxes, loading, seasonality, trends[J]. *Journal of Marine Systems*, 2013(111/112): 69–82.
- [39] Tong X, You L, Zhang J, et al. A comprehensive modelling approach to understanding the fate, transport and potential risks of emerging contaminants in a tropical reservoir[J]. *Water Research*, 2021, 200: 117298.
- [40] Ding Y, Cui K, Lv K, et al. Revealing the hydrological transport and attenuation of 14 antibiotics in a low-flow stream[J]. *Science of the Total Environment*, 2021, 761: 143288.
- [41] Hong Y, Feng C, Jin X, et al. A QSAR-ICE-SSD model prediction of the PNECs for alkylphenol substances and application in ecological risk assessment for rivers of a megacity[J]. *Environment International*, 2022, 167: 107367.
- [42] Lewis A J, Ebrahimi F, McKenzie E R, et al. Influence of microbial weathering on the partitioning of per- and polyfluoroalkyl

- substances(PFAS) in biosolids[J]. *Environmental Science;Processes & Impacts*,2023,25(3):415–431.
- [43] Zhang Q,Ying G,Pan C,et al. Comprehensive evaluation of antibiotics emission and fate in the river basins of China;source analysis,multimedia modeling,and linkage to bacterial resistance[J]. *Environmental Science & Technology*,2015,49(11):6772–6782.
- [44] Xie H,Shang M,Dong J,et al. A distributed and process-based model coupling water-sediment-antibiotic interactions to simulate dynamic source-transport-fate of antibiotics at catchment scale[J]. *Journal of Hazardous Materials*,2025,483:136681.
- [45] Kharraz J A,Jia M,Farid M U,et al. Determination of microplastic pollution in marine ecosystems and its effective removal using an advanced nanobubble flotation technique[J]. *Journal of Water Process Engineering*,2024,57:104637.
- [46] Zhou M,Zhang J,Sun C. Easier removal of nonylphenol and naphthalene pollutants in wet weather revealed by Markov chains modeling[J]. *Environmental Chemistry Letters*,2018,16(3):1089–1093.
- [47] Liang X,Guan Q,Clarke K C,et al. Sorption of perfluoroalkyl acids to fresh and aged nanoscale zerovalent iron particles[J]. *Environmental Science & Technology*,2018,52(11):6300–6308.
- [48] Dong H,Chen Y,Wang J,et al. Interactions of microplastics and antibiotic resistance genes and their effects on the aquaculture environments[J]. *Journal of Hazardous Materials*,2021,403:123961.
- [49] 李先国,兰宇宇,孙雨,等. 水环境中典型抗生素的光降解[J]. *中国海洋大学学报(自然科学版)*,2025,55(4):1–15.
- [50] 段学军,毛雨润,杜彦强,等. 生物炭去除水中抗生素的研究应用进展[J]. *中原工学院学报*,2025,36(3):63–71.
- [51] 张瞳瞳,胡红美,李铁军,等. 四环素类抗生素的污染现状及去除技术研究进展[J]. *环境科学与管理*,2025,50(6):82–87.
- [52] Pan C,Xiao S,Yu K,et al. Legacy and alternative per- and polyfluoroalkyl substances in a subtropical marine food web from the Beibu Gulf, South China; Fate, trophic transfer and health risk assessment[J]. *Journal of Hazardous Materials*,2021,403:123618.

[责任编辑:黄 敏]