

《土壤有机污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数

估算技术指南（征求意见稿）》

编制说明

《土壤有机污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数估算技术指南》编制工作组

二〇二四年十二月

目 次

1	项目背景.....	4
1.1	任务来源.....	4
1.2	工作过程.....	4
2	标准制订的必要性分析.....	5
2.1	污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数估算是污染物跨介质环境行为预测的理论基础.....	5
2.2	污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数估算可以作为土壤污染风险评价的关键技术.....	5
2.3	包含污染物垂直淋溶浓度衰减系数估算的土壤风险评价可以作为土壤环境管理的重要内容.....	5
3	基准制定的原则与依据.....	5
3.1	编制原则.....	5
3.2	编制依据.....	6
4	国内外土壤有机污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数估算方法发展现状.....	6
4.1	国外浓度衰减系数估算方法发展现状.....	6
4.2	国内浓度衰减系数估算方法发展现状.....	7
5	标准的主要内容及说明.....	7
5.1	适用范围.....	7
5.2	规范性引用文件.....	7
5.3	术语和定义.....	8
5.3.1	浓度衰减系数 Concentration Reduction Factor.....	8
5.4	总体要求.....	8
5.4.1	化合物类型特异性.....	8
5.4.2	情景特异性.....	8
5.5	估算技术流程.....	8
6	主要技术要点.....	9
6.1	土壤-地下水系统污染物运移过程.....	9
6.2	土壤-地下水系统污染物运移模拟.....	10
6.3	浓度衰减系数计算.....	11
7	标准与国内相关技术标准的比较.....	11
7.1	与《建设用地土壤污染风险评估技术导则》（HJ 25.3）的区别与联系.....	11
7.2	与《环境影响评价技术导则 地下水环境》的区别与联系.....	12
8	标准的预期作用与效益.....	12

9 对实施本标准的建议.....	12
主要参考文献.....	13

1 项目背景

1.1 任务来源

《土壤有机污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数估算技术指南》编制工作组（下称编制工作组）面相持续改善我国生态环境和建设“美丽中国”的重大需求，瞄准土壤-地下水复合污染的科技前沿，聚焦精准治污、科学治污和依法治污，支撑“十四五”期间土壤污染防治行动计划，为全面提升土壤与地下水安全利用水平提供关键科技支撑。科技部会同有关部门及地方，制定了国家重点研发计划“大气与土壤、地下水污染综合治理”专项实施方案，由中国科学院生态环境研究中心牵头实施，组织中科院建筑设计研究院有限公司、中国科学院地理科学与资源研究所等单位，开展土壤有机污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数估算技术指南的制定工作。

在土壤-地下水系统污染风险管控方面，为符合我国土壤环境特征、切合土壤环境管理工作的实际需求，编制工作组在大量资料收集、实地调研、实验检测、数据分析和模型模拟的基础上，综合国内外有关经验，提出土壤有机污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数估算的研究框架与方法体系，优先制定并发布有机污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数估算技术指南。

1.2 工作过程

2023年12月，编制工作组承担科学技术部场地“大气与土壤、地下水污染综合治理”专项“重点行业场地新污染物的环境风险”项目场地新污染物的环境风险技术规范及应用研究（2023YFC3706605）。

自承担该项目研究以来，编制工作组申请并主持《土壤有机污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数估算技术指南》团体标准编制工作，在政策解读、前期项目研究、文献综述、实地调研和模型构建等一系列准备工作的基础上，召开研讨会，讨论并且界定了开展本标准编制工作的原则、程序、步骤和方法，并最终编制形成《土壤有机污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数估算技术指南（征求意见稿）》（以下简称《指南》）及其编制说明，经历了如下编制工作过程。

2024年1-5月，编制工作组展开国内外相关文献调研，针对《指南》的总体定位、使用范围、编制思路、技术需求等问题召开多轮内部讨论会。

2024年6月，经编工作组申请、专家评审论证，中国土壤学会设立《指南》团体标准编制项目。

2024年7-8月，编制工作组汇总比较国内外相关研究基础，系统收集数据，构建并确定指南估算计算技术的概念模型，基于概念模型，开展污染物运移的模拟及有机污染物浓度衰减系数的估算技术研究。

2024年9月，编制工作组汇总先前工作收集的有关资料进行撰写，初步形成《指南（初稿）》。

2024年10-11月，编制工作组以视频会议和线下的形式组织召开多次专家咨询会，综合多方专家意见形成《指南》修改方案；组织召开内部讨论会，依据修改方案制定新一轮文献调研和有机污染物浓度衰减系数的估算方法的完善计划。

2024年12月，根据专家咨询意见和内部讨论结论，对《指南》进行多角度汇总和完善，并最终形成了《指南（征求意见稿）》和《指南（征求意见稿）》编制说明。

2 标准制订的必要性分析

2.1 污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数估算是污染物跨介质环境行为预测的理论基础

土壤-地下水系统污染过程包括污染物在土壤中的界面分配、垂直下渗以及与地下水混合扩散等污染过程，这些过程均能够影响土壤污染物下渗过程的浓度的变化。由于土壤-地下水污染物多界面作用机制复杂，界面迁移转化过程往往涉及物理、化学和生物过程的耦合，估算垂直淋溶浓度衰减系数，可用于量化污染物在包气带中的迁移速率和程度，这对于污染物从土壤到地下水的传输过程的模拟与预测至关重要。通过模型模拟污染物包气带垂直淋溶浓度衰减过程，估算污染物在包气带淋溶浓度的衰减系数可以成为土壤污染物的跨介质迁移转化等环境行为的预测的理论基础。

2.2 污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数估算可以作为土壤污染风险评价的关键技术

由于土壤与地下水具有紧密的水力联系，分配到土壤水相中的污染物可能会穿越非饱和带进入地下含水层，造成不同程度的地下水污染问题。我国现有的《建设用地土壤污染风险评估导则》(HJ 25.3)已强调了保护地下水的土壤风险控制值的重要性，但是该导则没有考虑在包气带垂直淋溶过程中的浓度衰减。在一定程度上因此影响了土壤风险评价结果的准确性。以地下水作为保护对象，开展污染土壤与地下水风险评价，是土壤污染风险管控的关键环节。通过预测土壤污染物通过包气带垂直淋溶到达地下水的浓度，能够提升土壤污染风险评价结果的准确性。

2.3 包含污染物垂直淋溶浓度衰减系数估算的土壤风险评价可以作为土壤环境管理的重要内容

随着我国快速城市化以及产业结构的调整，遗留下了大量的污染场地，污染问题突出。场地土壤中的有机污染物不仅可以通过直接暴露对人体健康和生态系统造成危害，还能迁移到其他环境介质如地表水体和地下水中对其造成污染，导致环境风险。近年来，世界各国高度重视基于风险的土壤环境管理模式，积极开展土壤污染生态风险评价工作，对于土壤环境治理从质量管理到风险管控的有效衔接具有里程碑意义。结合当前我国土壤污染防治工作的现实需求和土壤-地下水系统风险评价的研究进展，紧密结合国家环境管理目标的土壤污染过程中污染物的包气带浓度衰减系数估算方法，形成相关导则、技术文件，助力污染土壤环境的风险管理决策水平提高。

3 基准制定的原则与依据

3.1 编制原则

(1) 符合性原则

以《中华人民共和国环境保护法》《土壤污染防治法》《土壤污染防治行动计划》以及我国现行的土壤环境保护法律法规、条例、标准、指南、导则的相关规定和要求为主要编制依据，了解国内土壤-地下水系统污染过程研究现状和最新研究成果，确保我国土壤有机污染物包气带污染过程模拟符合政策

法规的相关要求和研究发展趋势，与现有土壤环境标准体系相互补充、相互支持。

（2）适用性原则

对国外发达国家土壤-地下水系统污染过程包气带浓度衰减系统估算的方法、体系、技术文件和研究现状等进行系统调研和深入梳理，充分借鉴国外发达国家先进经验和最新研究成果，结合我国现实国情特点进行集成创新，保证土壤有机污染物包气带垂直淋溶过程浓度衰减系数估算的科学性、合理性和可操作性。

（3）导向性原则。

充分考虑我国土壤环境特征和风险管理需求，以服务土壤环境质量的保护与改善为总体目标，建立健全土壤污染的风险评价机制，通过科学的生态风险评价加强土壤环境质量预警管理，制定针对性的土壤污染防治策略。

3.2 编制依据

土壤有机污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数估算是土壤污染生态环境风险评价的关键技术，因此本标准编制依据的法律、法规和规章主要是《中华人民共和国土壤污染防治法》和中共中央国务院《关于加快推进生态文明建设的意见》等。《中华人民共和国土壤污染防治法》对有关土壤污染生态环境风险的危害及标准体系提出具体要求，其中，第二章第十二条：“国务院生态环境主管部门根据土壤污染状况、公众健康风险、生态风险和科学技术水平，并按照土地用途，制定国家土壤污染风险管控标准，加强土壤污染防治标准体系建设”；第三章第二十条：“国务院生态环境主管部门应当会同国务院卫生健康等主管部门，根据对公众健康、生态环境的危害和影响程度，对土壤中有毒有害物质进行筛查评估，公布重点控制的土壤有毒有害物质名录，并适时更新”。《关于加快推进生态文明建设的意见》也提出了“全面推进污染防治，制定实施土壤污染防治行动计划，建立以保障人体健康为核心、以改善环境质量为目标、以防控环境风险为基线的环境管理体系，建立环境风险防范与应急管理工作机制的要求”。

4 国内外土壤有机污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数估算方法发展现状

4.1 国外浓度衰减系数估算方法发展现状

美国、加拿大等国家颁布了保护地下水的土壤环境标准。美国环境保护局（US EPA）1996年公布的《土壤筛选导则》提出了保护地下水的通用土壤筛选值并详尽阐释了该标准的推导方法，简称EPA方法^[1]。该方法假设污染羽从土壤表层扩展到含水面，并不考虑包气带和含水层中污染物的衰减过程（吸附、降解等）。模型基于保守的假设和默认参数，推导出了保护地下水的通用土壤标准。但针对具体的场地时，概念模型往往与导则保守的假设不一致。加拿大环境部长理事会（CCME）提出的保护地下水的土壤质量国家通用标准，与EPA方法类似，假设包气带污染范围扩散至地下水，且污染源无限，因此亦不存在包气带的衰减作用^[2]。US EPA和CCME相关技术导则中，模拟有机污染物在土壤-地下水系统中的垂向迁移过程如图1所示^[1, 2]。

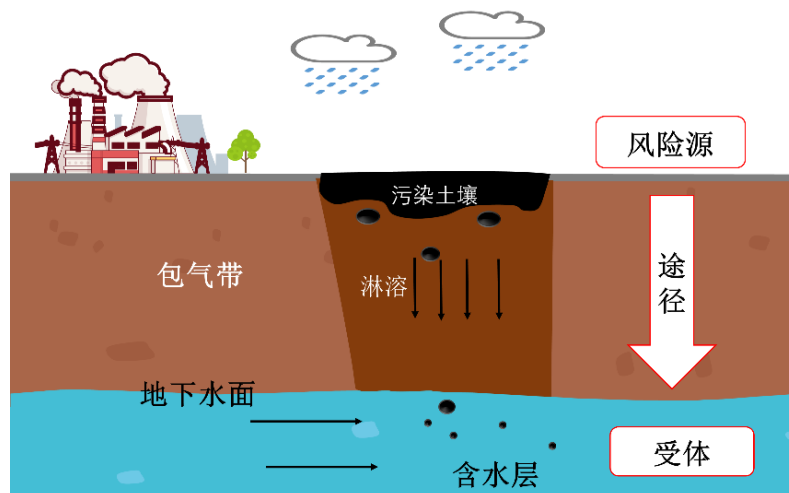


图 1 有机污染物土壤-地下水垂向迁移的源-途径-受体概念模型

4.2 国内浓度衰减系数估算方法发展现状

1999 年我国《工业企业土壤环境质量风险评价基准》首次提出保护地下水的土壤基准，用于切断有机物淋溶进入地下水的途径。随后，2014 年《污染场地风险评估技术导则》和现行的《建设用地土壤污染风险评估技术导则》提出了保护地下水的土壤阈值推导方法。与 EPA 方法类似，相关基准与导则均未考虑包气带和含水层中污染物的衰减过程。

5 标准的主要内容及说明

5.1 适用范围

本文件规定了土壤有机污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数估算技术的范围、规范性引用文件、术语和定义、总体要求和估算方法框架、数据收集、概念模型构建、污染物运移模拟以及浓度衰减系数计算。

本文件适用于有机物污染的土壤-地下水风险评价和基于地下水安全的土壤污染阈值推导。

5.2 规范性引用文件

本标准引用了下列文件或其中的条款。凡是不注日期的引用文件，其有效版本适用于本标准。

- GB 14148 地下水质量标准
- HJ 164 地下水环境监测技术规范
- HJ 166 土壤环境监测技术规范
- HJ 25.1 建设用地土壤污染状况调查技术导则
- HJ 25.2 建设用地土壤污染风险管控与修复监测技术导则
- HJ 25.3 建设用地土壤污染风险评估技术导则
- HJ 610 环境影响技术评价导则 地下水环境

5.3 术语和定义

下列术语和定义适用于本标准。

5.3.1 浓度衰减系数 Concentration Reduction Factor

土壤表层孔隙水与潜水层中污染物的浓度之比，无量纲。

5.4 总体要求

5.4.1 化合物类型特异性

基于溶质垂直运移模型 HYDRUS-1D 模拟化合物淋溶过程，前提条件为化合物在土壤剖面的浓度能够达到一个平衡状态，因此，只有通过模型模拟预测能达到平衡的化合物才适用于本标准规定的方法。

5.4.2 情景特异性

假设的情景为地下水浅层水扩散过程与包气带淋溶过程相耦合的情景，在地下水埋深较深，包气带水文过程不利于化合物淋溶的情景下，只涉及下渗过程的浓度衰减，因此，浓度衰减系数的计算中不需要考虑地下水的扩散稀释。

5.5 估算技术流程

本标准中土壤有机污染物包气带垂直淋溶削减系数估算方法框架主要包括：（1）数据收集；（2）概念模型构建；（3）土壤-地下水系统有机污染物运移模拟；（4）浓度衰减系数计算。方法框架如图 1 所示。

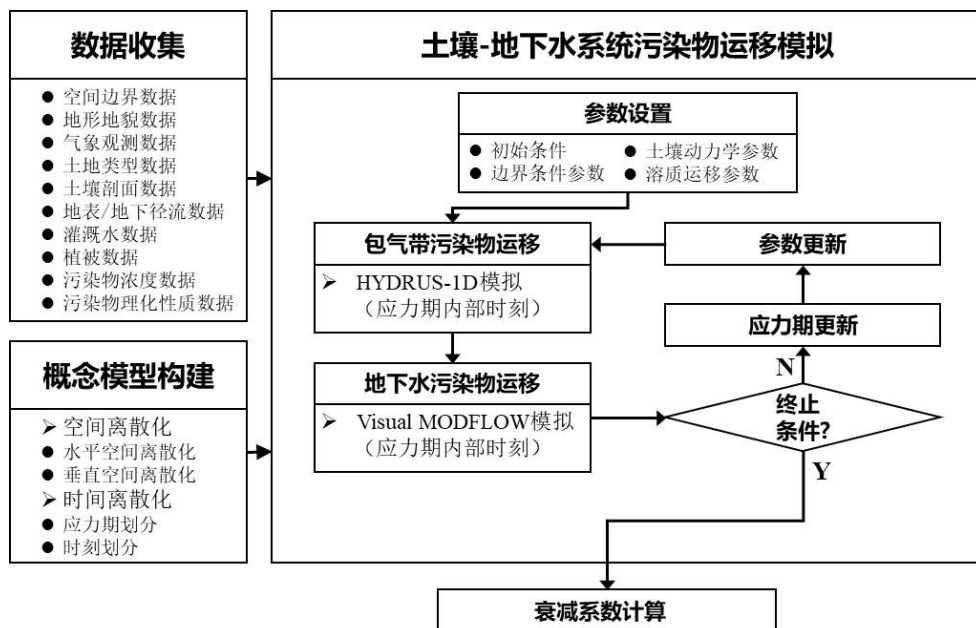


图 5-1 标准制订的技术路线图

6 主要技术要点

6.1 土壤-地下水系统污染物运移过程

地下水和土壤水中的有机污染物在对流和弥散等的共同作用下形成的物质运动现象，是污染物的主要运移过程。

其中，对流是指溶质随水流的整体运动而进行的迁移，是最主要的质量传递过程^[3]。水流整体运动的速度就是溶质对流运移的速度。对流通量 J 与水流达西流速成正比，其方向与水流速度方向相同。对流通量 J 的计算公式如下：

$$J = c \cdot q \quad (1)$$

式中， J 为对流通量 ($\text{mg}/\text{dm}^2/\text{s}$)； c 为浓度 (mg/dm^3)； q 为多孔介质中水流的达西流速 (dm/s)。

水力学弥散是指受对流影响之外的溶质扩散，包括两个过程：分子扩散和机械弥散^[4]。分子扩散是指分子从高浓度区域向低浓度区域的运动，在流速低时发挥主要作用。机械弥散是指由于微观多孔介质中水流速度不均而引起的污染物分子扩散，这导致对流携带的污染物分子并不都以地下水平均孔隙速度移动，单个污染物分子的流动速度比平均孔隙速度快或慢。水动力弥散系数是分子扩散和机械弥散系数之和，水动力弥散通量 J_h 计算公式如下：

$$J_h = -\theta D_e \frac{\partial c}{\partial z} \quad (4)$$

$$D_e = D + D_m \quad (5)$$

式中， D 为土壤中分子扩散系数 (dm^2/s)； D_m 为土壤中机械弥散系数 (dm^2/s)； D_e 为土壤中水动力

弥散系数 (dm^2/s)，由公式 (5) 计算； $\frac{\partial c}{\partial z}$ 为浓度梯度 (mg/dm^4)； θ 为体积含水量 (无量纲)。

在包气带运移过程中，还会发生吸附、降解等过程，这些过程引起的质量变化统称为源汇项。对于图 2 所示区域，根据质量守恒定律，该区域单位时间液相质量的变化=对流增加通量-对流减少通量+水动力弥散增加通量-水动力弥散减少通量-源汇项。各项的计算公式如表 1 所示，化简可得含有源汇项的一维对流弥散方程，即多孔介质中溶质运移的控制方程：

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -v \frac{\partial c}{\partial z} + D_e \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - S \quad (6)$$

$$v = \frac{q}{\theta} \quad (7)$$

式中， S 为溶质质量的减少量 ($\text{mg}/\text{dm}^3/\text{s}$)； v 为孔隙流速 (dm/s)，由公式 (7) 计算。

表 1 非饱和带溶质运移的质量平衡项

质量平衡项	公式
对流增加通量	$q \cdot c(z)$
对流减少通量	$q \cdot c(z + \Delta z)$
水动力弥散增加通量	$-\theta \cdot D_e \cdot \frac{\partial c(z)}{\partial z}$
水动力弥散减少通量	$-\theta \cdot D_e \cdot \frac{\partial c(z + \theta z)}{\partial z}$
源汇项	$\Delta z \cdot \theta \cdot S$
该区域单位时间液相质量变化	$\Delta z \cdot \theta \cdot \frac{\partial c}{\partial t}$

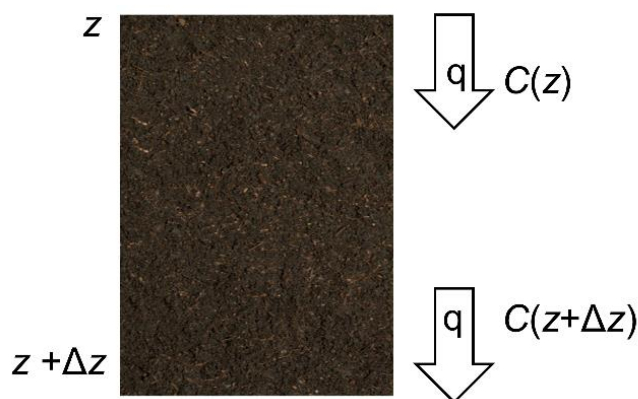


图1 多孔介质中溶质运移的质量守恒图示

注：图示区域水流向下； q 为达西流速（dm/s）； C 表示浓度（mg/dm³）； Z 表示位置。

6.2 土壤-地下水系统污染物运移模拟

根据溶质在非饱和带运移的控制方程的求解方法，非饱和带溶质运移模型可分为解析解或数值解。针对特定的假设条件（例如：均质土壤、简单的几何形状、高度简化的初始和边界条件），对流-弥散方程可以获得特定的解析解，用来预测给定场景下特定时间和位置污染物的浓度。Trolborg 等^[5]针对有机污染物在包气带中的运移推导出四个解析解，用来描述气体和水相中污染物运移的一系列场景。Stoppiello 等^[6]详细介绍了六个解析模型，并对比了同一污染情景下给定土壤深度模拟浓度的差异。Guo 等^[7]建立了 PFAS 包气带运移的稳态流解析模型。解析模型给出了特定的函数形式，并且需要较少的现场详细参数，这类模型被广泛应用于初步、快速的风险筛查^[8]。例如，ASTM 提供的淋溶因子解析模型被 RBCA 风险评估模型采用^[9]。Ki 和 Ray^{〔10〕}在传统的农药筛选指数中加入扩展项以考虑有机物挥发的质量损失，随后扩展的衰减因子被用于评估流域和国家尺度上农药的淋溶风险^{〔11〕〔12〕}。

然而，解析模型是基于高度简化的系统得出的，如各向同性和均质土壤层、线性控制方程和恒定边

界条件,这可能导致应用受限或定量结果不可靠^[13]。相比之下,数值模型可以模拟具有复杂初始和边界条件的三维、非均质和各向异性介质中具有不同类型反应的污染物传输^[14]。HYDRUS-1D 是基于过程的包气带模型,可以模拟水流和多种溶质在可变饱和多孔介质中的一维运动。该软件用 Fortran 语言编写,由 HYDRUS 计算程序和用户友好的交互式图形操作界面构成^[15]。在用户定义的边界条件下,采用 Galerkin 型线性有限元方法求解控制变饱和水流的 Richards 方程和控制溶质运移的对流弥散方程^[16, 17]。目前该计算程序已被广泛应用于土壤中多种物质迁移转化的研究,例如研究土壤中水和盐的迁移^[18],氮在土壤中的迁移和转化^[19],重金属离子的迁移^[20],以及农药的淋滤^[21]。Lyu 等^[22]将野外监测结果与模拟结果进行比较,验证了 HYDRUS-1D 模拟的可靠性。

HYDRUS-1D 模型模拟饱和孔隙介质中水、热、溶质的一维运移,主要包括两个过程,即利用 Richards 方程求解变饱和水流运移,以及利用对流-弥散方程通过有限元计算求解热、溶质的运移;地下水污染物运移模拟依赖 MODFLOW 模型,该模型是一个地下水三维有限差分数值模拟的工具,常用来模拟预测地下水中水流、溶质的时空变化。其中主要用到模拟地下水流的 MODFLOW 模块与模拟地下水中溶质运移的 MT3DMS 模块。

6.3 浓度衰减系数计算

包气带,即非饱和带是从地表到非承压含水层地下水水面之间的地质介质,有机污染物通过包气带垂直淋溶进入土壤,是其从土壤表面进入地下水的主要途径^[15]。在降水或灌溉水力的驱动下,土壤孔隙水中的有机污染物靠对流和水动力弥散作用的驱动,穿透包气带,最终到达地下水水面,造成地下水污染^[23]。在此期间,有机污染物经过包气带的自然衰减过程(吸附、降解、挥发),其浓度不断降低。

基于包气带污染物运移模拟,获得特定深度(包括表层土壤)随时间变化的溶质浓度,当特定深度污染物浓度达到动态平衡时,该深度的最大浓度视为土壤平衡浓度;基于地下水污染物运移模拟,获得潜水层中的污染物浓度。有机污染物通过包气带垂直淋溶进入地下水面的这一过程主要可以通过包气带衰减因子 AF(经过包气带前后污染物浓度的比值)这一参数进行量化^[2]。包气带衰减因子 AF 计算如公式(1)如下:

$$AF = \frac{C_e}{C_d} \quad (1)$$

式中, C_e 为土壤表层孔隙水中污染物的浓度 (mg/kg) (溶质运移模拟模型获得); C_d 为潜水层中污染物的浓度 (mg/kg)。

7 标准与国内相关技术标准的比较

7.1 与《建设用地土壤污染风险评估技术导则》(HJ 25.3)的区别与联系

(1)本标准涉及土壤有机污染物包气带垂直淋溶过程模拟,《建设用地土壤污染风险评估技术导则》

(HJ 25.3) 中基于土壤有机污染物包气带垂直淋溶过程的概化推导保护地下水的土壤风险控制值推导。因此，在考虑污染物包气带运移过程概化方面具有一致性。

(2) 本标准采用污染物包气带垂直淋溶模型进行了运移过程的浓度衰减，然而因此《建设用地土壤污染风险评估技术导则》只考虑淋溶过程中污染物的固-液分配，不考虑垂直运移过程整体浓度衰减，因此，本标准在过程概化和技术方法上较《建设用地土壤污染风险评估技术导则》(HJ 25.3) 更具有科学性。

7.2 与《环境影响评价技术导则 地下水环境》的区别与联系

(1) 本标准所规定的方法针对保护地下水的土壤污染风险评价所提出，与《环境影响评价技术导则 地下水环境》的地下水环境影响预测在目标上具有一致性。

(2) 本标准主要针对污染物在包气带中的运移过程，而《环境影响评价技术导则 地下水环境》主要考虑在饱和带中的运移过程，因此，两者在关注污染过程发生的环境介质方面不同。

8 标准的预期作用与效益

(1) 土壤污染生态环境风险评估

地下水是土壤污染生态环境风险的主要受体之一，本标准规定的土壤有机污染物包气带垂直淋溶浓度衰减系数估算技术能够为土壤中的污染物淋溶进入地下水的风险评价和预测提供技术支撑。

(2) 污染场地土壤修复目标值制定

保护地下水的土壤污染风险评价结果能够为污染场地土壤修复目标值制定提供依据，本标准与不同水文地质条件下土壤有机污染物包气带垂直淋溶过程密切联系，有利于相关利益方结合场地的水文地质条件，综合土壤污染程度及土壤性质制定土壤有机污染物的修复目标值。

(3) 土壤环境基准值制订的参考

开展污染场地土壤地下水环境风险评价，是进一步制定基于保护地下水的土壤环境质量指导值的重要依据，可以为有效遏制土壤环境质量退化提供基准和预警，本技术指南规定的土壤有机污染物包气带垂直淋溶浓度衰减过程是土壤有机污染物的安全阈值技术的关键步骤，能够为土壤有机污染物的安全阈值的推导及制订提供参考。

9 对实施本标准的建议

本指南为首次制订，对土壤-地下水风险评价的管理提供前瞻性的认识，拟为开展的针对污染场地及周边土壤的有机污染物地下水污染风险评价提供技术支撑。

本标准为指导性标准，建议标准发布实施后，建议在本标准实施过程中，继续广泛听取和收集各方面的意见与建议，并根据实际应用情况，适时对本标准不断地补充、修订与完善，使其实用性和可操作性与时俱进，为污染土壤修复行动的提供重要参考依据。

主要参考文献

- [1]U.S. Environmental Protection Agency (EPA). Environmental Protection Agency (EPA). Soil Screening Guidance: User's Guide [EB/OL]. <https://semspub.epa.gov/work/HQ/175238.pdf>. 1996.
- [2]Canadian Council of Ministers of the Environment (CCME). A Protocol for the Derivation of Environmental and Human Health Soil Quality Guidelines[EB/OL]. https://publications.gc.ca/collections/collection_2010/ccme/En108-4-8-2006-eng.pdf. 2006.
- [3]邵明安, 王全九, 黄明斌, 土壤物理学. 2006: 土壤物理学.
- [4]马蒙蒙, 层状土壤中水流和溶质运移特征及数值模拟. 2020, 青岛大学.
- [5]Troldborg, M., et al., Unsaturated zone leaching models for assessing risk to groundwater of contaminated sites. *Journal of Contaminant Hydrology*, 2009. 105(1): p. 28-37.
- [6]Stoppiello, M.G., et al., A Comparative Assessment of Analytical Fate and Transport Models of Organic Contaminants in Unsaturated Soils. *Sustainability*, 2020.
- [7]Guo, B. and B. Guo, A screening model for quantifying PFAS leaching in the vadose zone and mass discharge to groundwater. *Advances in Water Resources*, 2022. 160: p. 104102-.
- [8]Mazzieri, F., et al., Modeling contaminant leaching and transport to groundwater in Tier 2 risk assessment procedures of contaminated sites. *Environmental Earth Sciences*, 2016. 75(18): p. 1247.
- [9]Agency., U.E., Fact sheet for the RBCA tool kit for chemical releases[EB/OL]. (2009-03-11) [2022-08-10]. <http://www.environment-agency.gov.uk>. 2009.
- [10]Ki, S.J. and C. Ray, A GIS-assisted regional screening tool to evaluate the leaching potential of volatile and non-volatile pesticides. *Journal of Hydrology*, 2015. 522: p. 163-173.
- [11]Ray, C. and M.M. Hantush], Applying a statewide geospatial leaching tool for assessing soil vulnerability ratings for agrochemicals across the contiguous United States. *Water Research*, 2015.
- [12]Al-Turki, A.M., Assessment of the Environmental Risk of Pesticides Leaching at the Watershed Scale under Arid Climatic Conditions and Low Recharge Rates. *Water*, 2020. 12.
- [13]Mallants, D., R. Doble, and Y. Beiraghdar, Fate and transport modelling framework for assessing risks to soil and groundwater from chemicals accidentally released during surface operations: An Australian example application from shale gas developments. *Journal of Hydrology*, 2022. 604: p. 127271-.
- [14]Pietrzak, D., et al., Fate of selected neonicotinoid insecticides in soil–water systems: Current state of the art and knowledge gaps. *Chemosphere*, 2020. 255: p. 126981.
- [15]Šimůnek, J., M.T. van Genuchten, and M. Šejna, Recent Developments and Applications of the HYDRUS Computer Software Packages. *Vadose Zone Journal*, 2016. 15(7): p. vzj2016.04.0033.
- [16]Genuchten, Š. *Contaminant Transport in the Unsaturated Zone: Theory and Modeling*. 2016.
- [17]Šimůnek, J. and S.A. Bradford, *Vadose Zone Modeling: Introduction and Importance*. *Vadose Zone Journal*, 2008. 7(2): p. 581-586.

- [18]Alam, T., et al., Modeling transport, fate, and removal kinetics of nitrate and orthophosphate using recycled adsorbents for high and low-flow stormwater runoff treatment. *Chemosphere*, 2022. 287: p. 132152-.
- [19]Pan, W., et al., Experimental investigation and simulation of nitrogen transport in a subsurface infiltration system under saturated and unsaturated conditions. *Journal of Contaminant Hydrology*, 2020. 231: p. 103621.
- [20]Amiri, N. and M. Nakhaei, An investigation of qualitative variations of groundwater resources under municipal wastewater recharge using numerical and laboratory models, Nazarabad plain, Iran. 2021.
- [21]Anlauf, R., J. Schaefer, and P. Kajitvichyanukul, Coupling HYDRUS-1D with ArcGIS to estimate pesticide accumulation and leaching risk on a regional basis. *Journal of Environmental Management*, 2018. 217: p. 980-990.
- [22]Lyu, S., et al., Prioritizing environmental risks of pharmaceuticals and personal care products in reclaimed water on urban green space in Beijing. *Science of the Total Environment*, 2019(697-): p. 697.
- [23]Sarma, R. and S.K. Singh, Simulating contaminant transport in unsaturated and saturated groundwater zones. *Water Environment Research*, 2021.