

## 研究论文

DOI: 10.11949/0438-1157.

## 基于 QSAR-ICE-SSD 模型的典型绿色替代工艺特征污染物的生态效应评估

蔡语晨<sup>1</sup>, 张家玮<sup>1,2</sup>, 李滨<sup>1</sup>, 葛卉<sup>1</sup>, 张梦涛<sup>1</sup>, 杨烨文<sup>1</sup>, 谢容<sup>1</sup>, 倪佳华<sup>1</sup>, 史江红<sup>1</sup><sup>(1)</sup> 土壤污染防治与安全全国重点实验室, 南方科技大学环境科学与工程学院, 广东 深圳 518055; <sup>(2)</sup> 生态环境部环境规划院战略规划研究所, 北京 100041)

**摘要:** 面向过程工业绿色转型需求, 本研究针对甲基丙烯酸甲酯 (MMA) 和环氧丁烷 (BO) 生产涉及的 26 种特征污染物, 提出基于 QSAR-ICE-SSD 的多情境环境风险评估框架。依据毒性数据丰度, 构建差异化评估策略: 数据充足情境采用直接物种敏感性分布 (SSD) 法; 数据不足情境采用 ICE-SSD 种间外推法; 数据缺失情境采用 QSAR-ICE-SSD 预测法与毒性试验-ICE-SSD 实验法。通过整合 QSAR 模型、Web-ICE 平台及标准化毒性测试, 系统完善了覆盖藻类、溞类、鱼类的 300 余条急性毒性数据。基于多函数拟合 SSD 模型推导预测无效应浓度 (PNEC), 26 种物质急性 PNEC 介于 0.0027 mg/L (丙烯醛) ~1030 mg/L (丙酮)。经急慢性比 (ACR) 换算获得慢性 PNEC, 进一步确定最大允许排放浓度 ( $C_{allow}$ )。结果表明, 低  $C_{allow}$  物质需在化工废水处理中重点监控并确保出水严格达标。该框架突破了数据稀缺性制约, 为特征污染物的源头削减与风险预警提供了量化技术支撑。

**关键词:** ICE-SSD 模型; 生态风险评估; 多情境; 定量构效关系 (QSAR); 绿色替代工艺

中图分类号: X 826; X 52

文献标志码: A

文章编号: 0438-1157 (XXXX) XX-0001-17

## Ecological effect assessment of typical green alternative process characteristic pollutants based on QSAR-ICE-SSD model

CAI Yuchen<sup>1</sup>, ZHANG Jiawei<sup>1,2</sup>, LI Bin<sup>1</sup>, GE Hui<sup>1</sup>, ZHANG Mengtao<sup>1</sup>, YANG Yewen<sup>1</sup>, XIE Rong<sup>1</sup>, NI Jiahua<sup>1</sup>, SHI Jianghong<sup>1</sup>

<sup>(1)</sup> Guangdong Provincial Key Laboratory of soil and Groundwater Pollution Control, School of Environmental Science and Engineering, Southern University of Science and Technology, Shenzhen 518055, Guangdong, China; <sup>(2)</sup> Institute of Strategic Planning, Planning Institute of the Ministry of Ecology and Environment, Beijing 100041, China)

**Abstract:** In order to meet the needs of green transformation of process industry, this study proposes a multi-context environmental risk assessment framework based on QSAR-ICE-SSD for 26 characteristic pollutants involved in the production of methyl methacrylate (MMA) and epoxybutane (BO). According to the abundance of toxicity data, a differentiated evaluation strategy was constructed: the direct species sensitivity distribution (SSD) method was used in the data-rich situation; the ICE-SSD interspecific extrapolation method was used in the

收稿日期: 2026-03-31 修回日期: 2026-07-15

通信作者: 张梦涛(1989—), 男, 博士, 副研究员, zhangmt@sustech.edu.cn; 葛卉(1989—), 女, 博士, 高级访问学者, geh@sustech.edu.cn

第一作者: 蔡语晨(2002—), 女, 硕士研究生, 12432875@mail.sustech.edu.cn

基金项目: 国家重点研发计划(2022YFC3902201); 国家自然科学基金项目(42477395); 深圳市基础研究专项(自然科学基金)基础研究面上项目(JCYJ20240813094805008, JCYJ20250604144644060)

引用本文: 蔡语晨, 张家玮, 李滨, 葛卉, 张梦涛, 杨烨文, 谢容, 倪佳华, 史江红. 基于 QSAR-ICE-SSD 模型的典型绿色替代工艺特征污染物的生态效应评估[J]. 化工学报, XXXX, XX(XX): 1–17

**Citation:** CAI Yuchen, ZHANG Jiawei, LI Bin, GE Hui, ZHANG Mengtao, YANG Yewen, XIE Rong, NI Jiahua, SHI Jianghong. Ecological effect assessment of typical green alternative process characteristic pollutants based on QSAR-ICE-SSD model[J]. CIESC Journal, XXXX, XX(XX): 1–17

situation of insufficient data. QSAR-ICE-SSD prediction method and toxicity test-ICE-SSD experiment method were used in data missing situation. By integrating QSAR model, Web-ICE platform and standardized toxicity test, more than 300 acute toxicity data covering algae, daphnia and fish were systematically improved. Based on the multi-function fitting SSD model, the predicted no effect concentration (PNEC) was derived, and the acute PNEC of 26 substances was between 0.0027 mg / L (acrolein) and 1030 mg / L (acetone). Chronic PNEC was obtained by acute to chronic ratio (ACR) conversion to further determine the maximum allowable emission concentration ( $C_{\text{allow}}$ ). The results show that low  $C_{\text{allow}}$  substances need to be monitored in chemical wastewater treatment and ensure that the effluent is strictly up to standard. The framework breaks through the constraints of data scarcity and provides quantitative technical support for source reduction and risk warning of characteristic pollutants.

**Keywords:** ICE-SSD model; ecological risk assessment; multi-scenario; quantitative structure-activity relationship (QSAR); green alternative process

## 引 言

在过程工业中,绿色合成工艺的转型使用了多种化工原料,这些化工原料对水生生态系统的稳定性构成显著威胁。以甲基丙烯酸甲酯(MMA)和环氧丁烷(BO)为代表的碳四醚酯产品,在现代化工业体系中占据核心地位。根据行业数据统计,2024年中国MMA产能达267.5万吨,表观消费量增至129.43万吨,而BO作为关键的有机合成中间体,全球市场规模预计将在2030年达到1.1亿美元,这一数据不仅揭示了环氧丁烷市场的巨大增长潜力,也预示着其在未来化学工业中的重要地位。然而,这两类产品的生产工艺常涉及氰、氯等高危害原料,这些物质在生产、运输及处置过程中,极易通过多种途径进入大气、土壤及水体等多介质环境,风险管控难度大且体系亟待完善。进入环境的特征污染物不仅对水生生态系统具有显著的毒性冲击,更对区域环境安全构成持续威胁。因此,从源头开展化学品风险管控,不仅是打好污染防治攻坚战的关键路径,更是促进国民经济可持续发展的先决条件。基于此,本研究从MMA和BO的生产工艺特征出发,选取涉及的26种特征污染物为研究对象,通过集成实验与模型模拟手段构建多情境适用的环境风险评估模型,旨在为过程工业的源头减排与风险预警提供科学依据。

目前,物种敏感性分布(SSD)模型作为推导环境质量基准(WQC)及进行生态风险评价的核心工具,已被国际权威机构广泛采纳<sup>[1-3]</sup>。然而,面对化工工艺中大规模特征污染物的筛查,传统基于生物实测数据(如 $LC_{50}$ 或 $EC_{50}$ )的SSD构建方法面临显著挑战:一是数据稀缺性,多数中间体缺乏多营养层

级的标准毒性数据;二是实验成本与伦理限制,难以对数十种物质进行全谱系毒性测试<sup>[4,5]</sup>。

针对上述瓶颈,定量构效关系(QSAR)与种间相关估计(ICE)模型的兴起,为多源数据融合评估提供了新路径<sup>[6,7]</sup>。本研究旨在构建一套集成多源数据SSD评估框架,针对MMA与BO生产工艺中特征污染物毒性数据充足、不足和缺失下三种情况下的四种风险评估路线,开发稳健且多情境适用的评估模型。

本文以MMA及BO工艺涉及的26种特征污染物为研究对象进行系统验证,旨在形成一套基于ICE-SSD模型的全过程风险评估方法逻辑,为我国过程工业的环境风险管理提供定量化的科学依据与技术支撑。

## 1 实验与方法

### 1.1 环境风险评估框架与流程

环境风险评估旨在定量识别化工品进入环境后对生态受体的潜在威胁。本研究构建的模型框架主要由四个核心模块组成:危害识别、暴露评估、生态效应评价及环境风险表征。

在技术路径上,本框架强调在数据稀缺情景下的预测能力,通过计算毒理学工具(QSAR/ICE)或毒理试验填补效应数据空白,最终利用统计学手段(SSD)推导出保护阈值,从而实现对复杂化工环境影响的精准量化。化学物质环境风险精准表征技术流程参见图1。

综合分析化学品理化性质、生产使用方式及潜在暴露途径,据此识别需要开展环境风险评估的目标化学品。随后,基于准确性、相关性、可靠性原则<sup>[8,9]</sup>,从ECOTOX毒性数据库检索并筛选目标物质

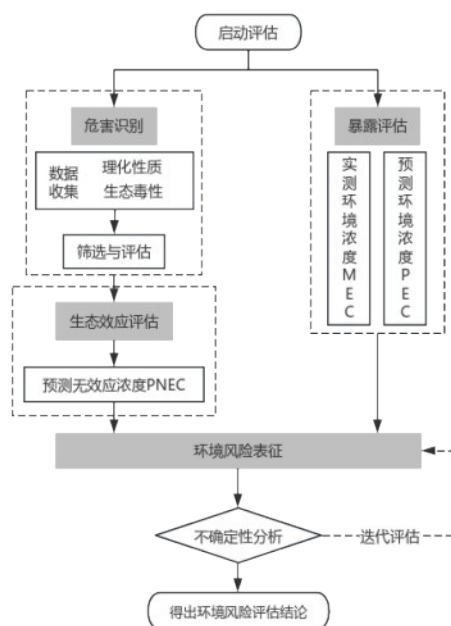


图1 环境风险评估工作技术流程

Fig.1 Technical process of environmental risk assessment

的急、慢性毒性数据<sup>[10]</sup>。

在获取充足毒性数据的基础上,利用SSD模型对数据进行概率分布拟合。通过已构建的SSD曲线可得到反映95%物种未受影响的浓度( $HC_5$ )值,通过计算公式对整理的毒性数据进行预测无效应浓度(PNEC)推导,计算公式如下:

$$PNEC = \frac{HC_5}{AF} \quad (1)$$

式中,AF为评估因子,取1~5。关于AF的取值,《淡水生物水质基准推导技术指南(HJ 831-2022)》中规定:AF的数值根据推导基准所用数据的数量、受试物种涵盖范围和数据拟合分布等情况综合确定,一般取值为2~5;当有效毒性数据包括的物种数量大于15时,AF取值为2;有效毒性数据包括的物种数量小于等于15时,一般取值为3。本示例中AF值取2。

暴露评估通过现场监测法与模型预测法,系统定量化学物质在不同环境介质中的暴露水平,并以实测环境浓度(MEC)或预测环境浓度(PEC)作为风险表征的基础数据。

综合危害识别、暴露评估和生态效应评估结果,采用商值法表征化学品在环境介质中的风险,定量描述环境风险大小及其不确定性。

商值法通过计算环境风险商,获得风险评估结论,其计算方法见公式(2)。

$$RQ = \frac{PEC}{PNEC} \text{ 或 } RQ = \frac{MEC}{PNEC} \quad (2)$$

当 $RQ < 0.1$ ,表明无生态风险,无需采取进一步措施;当 $0.1 \leq RQ < 1.0$ ,表明存在一定的风险,需对相关环境进行跟踪观察;当 $RQ \geq 1.0$ ,表明存在较为严重的风险,需采取相应措施降低风险<sup>[11]</sup>。

## 1.2 数据获取与评估情境分类

本研究基于子课题一通过甲基丙烯酸甲酯与环氧丁烷生产工艺和产排污等过程分析确定的共26种代表性化学物质名单(表1),其中,MMA工艺共有18种代表性化学物质,BO工艺涉及9种代表性化学物质,甲醇为两个工艺体系中共有物质。使用美国环境保护局的ECOTOX数据库(<https://cfpub.epa.gov/ecotox/>)对代表性化学物质的毒性数据进行检索。依据《淡水生物水质基准推导技术指南(HJ 831-2022)》的数据筛选原则对收集的毒性数据进行筛选,确保毒性数据的科学性和准确性。根据《淡水生物水质基准推导技术指南(HJ 831-2022)》对毒性数据的最小数据量要求(至少包括10个物种的毒性数据),将代表性化学物质分为毒性数据充足、毒性数据不足和毒性数据缺失3种情况。通过对26种化工原料进行情境识别,结果显示,处于数据不足与数据缺失的物质占比最高,急性毒性达到73.08%。这一分布特征客观反映了当前化工行业在环境风险评价中面临的现实困境:超过三分之二的物质由于缺乏充足的实验毒性数据,无法通过传统评价手段获得可靠的环境阈值。

基于毒性数据充足、毒性数据不足和毒性数据缺失3种情况定义四种情境的判定标准。针对化工原料毒性数据获取难度不一、数据丰沛度差异显著的现状,本研究根据数据的完整性,建立了四种情境下的评估路线。该分类逻辑旨在确保无论在何种数据环境下,均能通过技术框架推导出科学合理的预测无效应浓度(PNEC)。生态效应评估技术路线如图2所示。

**1.2.1 毒性数据充足情境(SSD)** 当获取的物种毒性数据充足(物种数量 $\geq 10$ )且满足SSD模型对数据的基本要求时,可采用SSD模型推算PNEC,具体计算步骤与公式详见1.1节。**1.2.2 毒性数据不足情境(ICE-SSD)** 当获取的物种毒性数据不足( $1 \leq$ 物种数量 $< 10$ ),不能满足SSD模型对数据的基本要求时,可首先使用种间相关估计(ICE)模型外推获取缺少的对其他物种的毒性数据,然后利用SSD模型推算PNEC。应确保ICE模型的适用性、充分性和可靠性

表1 MMA和BO生产工艺代表性化学物质名单  
Table 1 A list of representative chemicals for MMA and BO production processes

| 序号 | 工艺名称   | 物质名称       | CAS号      | 急性数据是否充足 |
|----|--------|------------|-----------|----------|
| 1  | MMA 工艺 | 甲基丙烯酸醛     | 78-85-3   | 缺失       |
| 2  |        | 甲基丙烯酸      | 79-41-4   | 缺失       |
| 3  |        | 甲基丙烯酸甲酯    | 80-62-6   | 不足       |
| 4  |        | 丙烯酸        | 79-10-7   | 不足       |
| 5  |        | 丙烯酸甲酯      | 96-33-3   | 不足       |
| 6  |        | 甲基丙烯酸乙酯    | 97-63-2   | 不足       |
| 7  |        | 丙酸         | 79-09-4   | 不足       |
| 8  |        | 丙烯醛        | 107-02-8  | 充足       |
| 9  |        | 丙醛         | 123-38-6  | 不足       |
| 10 |        | 甲醛         | 50-00-0   | 充足       |
| 11 |        | 甲醇         | 67-56-1   | 充足       |
| 12 |        | 甲苯         | 108-88-3  | 充足       |
| 13 |        | 乙酸         | 64-19-7   | 不足       |
| 14 |        | 乙醛         | 75-07-0   | 不足       |
| 15 |        | 二甲醚        | 115-10-6  | 不足       |
| 16 |        | 丙酮         | 67-64-1   | 充足       |
| 17 |        | 2-丁烯酸      | 3724-65-0 | 缺失       |
| 18 |        | 丙醇         | 71-23-8   | 充足       |
| 19 | BO 工艺  | 碳酸 1,2-丁烯酯 | 4437-85-8 | 不足       |
| 20 |        | 1,2-环氧丁烷   | 106-88-7  | 缺失       |
| 21 |        | 碳酸二甲酯      | 616-38-6  | 缺失       |
| 22 |        | 1,2-丁二醇    | 584-03-2  | 缺失       |
| 23 |        | 氨基甲酸甲酯     | 598-55-0  | 不足       |
| 24 |        | 甲醇         | 67-56-1   | 充足       |
| 25 |        | 乙醇         | 64-17-5   | 充足       |
| 26 |        | 乙二醇        | 107-21-1  | 不足       |
| 27 |        | 碳酸二乙酯      | 105-58-8  | 缺失       |

已得到充分论证说明。

1.2.3 毒性数据缺失情境(QSAR-ICE-SSD) 当获取的物种毒性数据缺失,无法推算PNEC。可选用QSAR模型预测模式物种(如羊角月牙藻、大型蚤、斑马鱼、黑头呆鱼等)生态毒性数据,确保QSAR模型的科学性、估算方法、应用域等得到充分论证说明。通过QSAR模型获取某一种物种的生态毒性数据后,可使用ICE模型外推获取足够的对其他物种的毒性数据后,再利用SSD模型推算PNEC。

1.2.4 毒性数据缺失情境(毒性试验-ICE-SSD) 当获取的物种毒性数据缺失,也可以通过毒性试验获取毒性数据后,使用ICE模型外推获取充足数据后,再利用SSD模型推算PNEC。

根据上述四种情境,针对于26种代表性化学物质的生态效应评估方法进行汇总,汇总结果如表2所示。

### 1.3 生态效应评估框架与模型构建

本研究构建的生态风险评估框架核心由以下三类模型及毒性试验组成:

1.3.1 毒性预测模型:定量构效关系(QSAR)模型通过量化分子描述符来预测未经测试化学物质的生态毒性,是填补数据空白的高效工具<sup>[12]</sup>。作为一种高效的非测试方法, QSAR模型在填补化工品毒性数据真空及实现高通量风险预警方面具有显著优势<sup>[13, 14]</sup>。随着计算化学与人工智能技术的深度融合,除主成分分析(PCA)<sup>[15]</sup>、偏最小二乘法(PLS)<sup>[16]</sup>等传统统计学方法外,基于机器学习(ML)与深度学习(DL)的预测架构已成为当前主流<sup>[17-19]</sup>。

本研究使用了 Erik Kristiansson 研究团队在 Science Advances 上发表的最新研究采用集成 RoBERTa 变压器(Transformers)与深度神经网络(DNN)的最前沿预测架构<sup>[20]</sup>。该模型经过10-fold交叉验证(验证,对鱼类、水生无脊椎动物和藻类的急性毒性( $EC_{50}$ )预测中位误差因子分别为2.66、2.82和3.16,扩展模型(联合 $EC_{50}$ 训练)进一步将误差降低至2.00~2.09(中位值)。模型通过预训练的SMILES字符串深度提取化学物质的微观结构特征,并耦合暴露时间与毒性终点数据,实现对水生生物急性及慢性毒性浓度的精准预测。

1.3.2 种间外推模型:种间相关估计(ICE)模型基于生物对化学物质敏感性的共线性原理,利用最小二乘法建立不同物种间急性毒性终点( $LC_{50}$ 或 $EC_{50}$ )的线性回归关联<sup>[21]</sup>。该模型通过已知“替代物

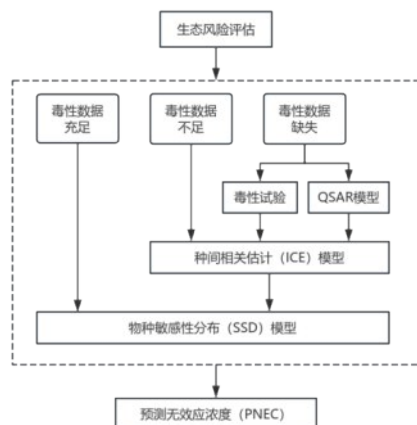


图2 生态效应评估技术路线

Fig.2 Technical route of ecological effect assessment

表2 MMA和BO生产工艺代表性化学物质生态效应评估方法

Table 2 Evaluation method of ecological effects of representative chemicals in MMA and BO production process

| 序号 | 工艺名称   | 物质名称       | 急性毒性数据生态效应评估方法    |
|----|--------|------------|-------------------|
| 1  | MMA 工艺 | 甲基丙烯酸酯     | 毒性试验-QSAR-ICE-SSD |
| 2  |        | 甲基丙烯酸      | 毒性试验-QSAR-ICE-SSD |
| 3  |        | 甲基丙烯酸甲酯    | ICE-SSD           |
| 4  |        | 丙烯酸        | QSAR-ICE-SSD      |
| 5  |        | 丙烯酸甲酯      | QSAR-ICE-SSD      |
| 6  |        | 甲基丙烯酸乙酯    | QSAR-ICE-SSD      |
| 7  |        | 丙酸         | QSAR-ICE-SSD      |
| 8  |        | 丙烯酸        | SSD               |
| 9  |        | 丙醛         | ICE-SSD           |
| 10 |        | 甲醛         | SSD               |
| 11 |        | 甲醇         | SSD               |
| 12 |        | 甲苯         | SSD               |
| 13 |        | 乙酸         | ICE-SSD           |
| 14 |        | 乙醛         | QSAR-ICE-SSD      |
| 15 |        | 二甲醚        | QSAR-ICE-SSD      |
| 16 |        | 丙酮         | SSD               |
| 17 |        | 2-丁烯酸      | QSAR-ICE-SSD      |
| 18 |        | 丙醇         | SSD               |
| 19 | BO 工艺  | 碳酸 1,2-丁烯酯 | ICE-SSD           |
| 20 |        | 1,2-环氧丁烷   | 毒性试验-QSAR-ICE-SSD |
| 21 |        | 碳酸二甲酯      | QSAR-ICE-SSD      |
| 22 |        | 1,2-丁二醇    | 毒性试验-QSAR-ICE-SSD |
| 23 |        | 氨基甲酸甲酯     | QSAR-ICE-SSD      |
| 24 |        | 甲醇         | SSD               |
| 25 |        | 乙醇         | SSD               |
| 26 |        | 乙二醇        | ICE-SSD           |
| 27 |        | 碳酸二乙酯      | QSAR-ICE-SSD      |

种”的毒性数据,科学外推缺失的“预测物种”效应值,其数学表征如公式(3)所示:

$$\log_{10} X_2 = a + b \log_{10} X_1 \quad (3)$$

本研究通过 Web-ICE 平台 (<https://www3.epa.gov/ceampubl/fchain/webice/index.html>) 检索并筛选覆盖水生及陆地生物的预测模块。为最大限度降低外推过程的不确定性,确保数据丰度扩展的稳健性,本研究设定如下模型筛选准则:1)模型均方误差(MSE) < 0.95; 2)相关系数(R<sup>2</sup>) > 0.6; 3)斜率(slope) ≥ 0.6<sup>[4]</sup>; 4)分类学距离,替代物种和预测物种间 < 4; 5)置信区间,预测结果上下限小于一个数量级。

通过上述准则筛选出的预测值将作为补充数据来源,用于支撑后续物种敏感性分布(SSD)曲线的构建。

1.3.3 物种敏感性分布模型:物种敏感性分布(Species Sensitivity Distribution, SSD)模型是基于概率统计原理,通过拟合特定污染物对多物种的毒性效应数据,定量描述物种间的敏感性差异。其核心目标是推导生态安全阈值,即通过 SSD 曲线确定 HC<sub>5</sub>, 以此作为预测无效应浓度(PNEC)的科学依据。目前,该模型已被广泛应用于化学品生态风险评估评价体系<sup>[22]</sup>。目前 SSD 模型的构建尚未有统一的方法,从统计学原理出发,SSD 模型的构建主要分为基于确定概率的参数拟合法与基于抽样分布的非参数拟合法两种方法<sup>[10]</sup>。前者假设某种化学品的生态毒理学数据服从某种特定的数学分布,主要采用对数-正态(Log-normal)、对数-逻辑斯蒂(Log-logistic)、对数-冈布尔(Log-Gumbel)、威布尔(Weibull)等函数进行拟合,这些函数能够为数据集提供较好的拟合效果<sup>[23]</sup>;后者则采用蒙特卡罗(Monte Carlo)法、bootstrap 法等进行 SSD 模型的构建,这能够应用于由于参数估计困难而不适用于小样本量的数据集。

根据模型拟合优度评价参数评价模型的拟合度,这些参数包括:Anderson-Darling 检验、Kolmogorov-Smirnov 检验、赤池信息准则(Akaike's Information Criterion, AIC)等方法。根据拟合优度评价结果,结合专业判断,在 p > 0.05 的拟合模型中,选择最优拟合模型<sup>[24]</sup>。最优拟合模型得出的曲线应与参与拟合的数据点吻合良好,确保根据拟合的 SSD 曲线在统计学上具有合理性和可靠性。

在本模型中,SSD 模型的构建步骤参考了课题组前期对于长三角地区地表水壬基酚生态风险评估的方法步骤<sup>[10]</sup>。使用最小样本量通过统计学手段确定获得稳定 SSD 所需的最小数据量,从而提高 SSD 模型的稳定性和准确性<sup>[25]</sup>。

1.3.4 毒性试验:在毒性试验中,采用具有不同营养级代表性的三类模式水生生物(藻、蚤、鱼,代表三种不同营养级)进行毒性数据补充。针对化学物质对藻类生长的抑制作用,依据国家标准《化学品-藻类生长抑制试验》(GB/T 21805-2008)进行。针对化学物质对浮游动物生长的抑制作用,依据国家标准《大型蚤急性毒性实验方法》(GB/T 16125-2012)进行。针对化学物质对水生脊椎动物生长的

抑制作用,依据国家标准《化学品 鱼类急性毒性试验》(GB/T 27861-2011)进行。

## 2 实验结果与讨论

### 2.1 毒性试验补充毒性数据

2.1.1 小球藻(*Chlorella sp.*)毒性试验:毒性试验所用的小球藻(*Chlorella sp.*)购自中国科学院水生生物研究所淡水藻种库,编号为FACHB-36。在无菌条件下用BG11培养基进行藻种的培养,培养容器为250 mL锥形瓶,瓶口用封瓶膜密封。使用光照培养箱进行小球藻藻种培养,温度 $25\pm 1\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,光照强度3000 Lux,光暗比为12 h:12 h,每天人工振荡3-4次。毒性试验前将小球藻用新鲜培养基转接扩培一次,待其达到对数生长期后开始毒性试验。小球藻急慢性毒性试验初始藻细胞密度为 $5\times 10^5$ 个/mL。根据预实验结果,1,2-环氧丁烷、1,2-丁二醇、甲基丙烯醛和甲基丙烯酸4种受试物质对小球藻毒性试验的浓度梯度设置如表3所示,同时设置空白对照组,且每个浓度均设置3组平行,暴露时间为96 h,试验条件与藻种培养条件一致。

表3 受试物质毒性试验浓度梯度

Table 3 Toxicity test concentration gradient of the test substance

| 受试物质名称        | 受试物质浓度梯度 |     |     |     |     |
|---------------|----------|-----|-----|-----|-----|
| 1,2-环氧丁烷(g/L) | 0.4      | 0.6 | 0.8 | 1   | 2   |
| 1,2-丁二醇(g/L)  | 2        | 5   | 8   | 10  | 20  |
| 甲基丙烯醛(mg/L)   | 1        | 2   | 5   | 10  | 20  |
| 甲基丙烯酸(mg/L)   | 10       | 50  | 100 | 150 | 200 |

以受试物质浓度的对数值为横坐标,小球藻生长抑制率为纵坐标,绘制浓度-效应曲线。通过拟合得到4种受试物对小球藻的96 h的 $EC_{50}$ (表征急性毒性),结果如表4所示。依据《新化学物质危害评估导则》(HJ/T 154-2004)中对新化学物质的生态毒理学危害性分级标准,除了甲基丙烯醛的生态毒理学危害为中级( $10\text{ mg/L}<EC_{50}=25.48\text{ mg/L}<100\text{ mg/L}$ ),甲基丙烯酸、1,2-环氧丁烷和1,2-丁二醇的生态毒理学危害级别均为低级( $EC_{50}>100\text{ mg/L}$ )。

2.1.2 大型蚤(*Daphnia magna*)毒性试验:毒性试验所用的大型蚤(*Daphnia magna*)购自山东一溪月生物科技有限公司。实验前设置驯养期,实验用蚤在实验条件下驯养10 d。用小球藻对大型蚤进行蚤种培养,培养容器为2 L聚丙烯水箱。使用光照

表4 1,2-环氧丁烷、1,2-丁二醇、甲基丙烯醛和甲基丙烯酸对小球藻的96h的 $EC_{50}$

Table 4 The 96h  $EC_{50}$  of 1,2-epoxybutane, 1,2-butanediol, methacrolein and methacrylic acid on *Chlorella* were determined

| 受试物质名称        | $EC_{50}$ (95% 置信区间) |
|---------------|----------------------|
| 1,2-环氧丁烷(g/L) | 1.76(1.55-1.97)      |
| 1,2-丁二醇(g/L)  | 9.79(0.00-38.81)     |
| 甲基丙烯醛(mg/L)   | 25.48(0.00-500.77)   |
| 甲基丙烯酸(mg/L)   | 133.57(7.03-260.103) |

培养箱进行大型蚤蚤种培养,温度 $23\pm 1\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,光照强度3000 Lux,光暗比为16 h:8 h。根据预实验结果,1,2-环氧丁烷、1,2-丁二醇、甲基丙烯醛和甲基丙烯酸4种受试物质对大型蚤毒性试验的浓度梯度设置如表5所示,同时设置空白对照组,且每个浓度均设置3组平行,暴露时间为48 h,试验条件与蚤类培养条件一致。

表5 受试物质毒性试验浓度梯度

Table 5 Toxicity test concentration gradient of the test substance

| 受试物质名称        | 受试物质浓度梯度 |     |     |     |     |
|---------------|----------|-----|-----|-----|-----|
| 1,2-环氧丁烷(g/L) | 0.4      | 0.6 | 0.8 | 1   | 2   |
| 1,2-丁二醇(g/L)  | 2        | 5   | 8   | 10  | 20  |
| 甲基丙烯醛(mg/L)   | 1        | 2   | 5   | 10  | 20  |
| 甲基丙烯酸(mg/L)   | 10       | 50  | 100 | 150 | 200 |

以受试物质浓度对数值为横坐标,大型蚤抑制率为纵坐标,绘制浓度-效应曲线。通过拟合得到4种受试物对大型蚤的48 h的 $EC_{50}$ (表征急性毒性),结果如表6所示。据《新化学物质危害评估导则》(HJ/T 154-2004)中对新化学物质的生态毒理学危害性分级标准,除了甲基丙烯酸的生态毒理学危害为中级( $10\text{ mg/L}<EC_{50}=57.36\text{ mg/L}<100\text{ mg/L}$ ),甲基丙烯醛的生态毒理学危害为高级( $1\text{ mg/L}<EC_{50}=8.91\text{ mg/L}<10\text{ mg/L}$ )。1,2-环氧丁烷和1,2-丁二醇的生态毒理学危害级别均为低级( $EC_{50}>100\text{ mg/L}$ )。

需要说明的是,部分特征污染物(如1,2-丁二醇、甲基丙烯醛等)测得的 $EC_{50}$ 表现出95%置信区间偏宽的现象。其主要原因在于,根据联合国《全球化学品统一分类和标签制度》(GHS),水生生物急性毒性值 $>100\text{ mg/L}$ 的物质属于水生环境无危害的“未分类”级别。在实际试验中,由于此类物质水生生态风险极低且高浓度受溶解度或受试生物渗透

表6 1,2-环氧丁烷、1,2-丁二醇、甲基丙烯醛和甲基丙烯酸对大型溞的48 h的 $EC_{50}$

Table 6 48 h  $EC_{50}$  of 1,2-epoxybutane, 1,2-butanediol, methacrolein and methacrylic acid on *Daphnia magna*

| 受试物质名称        | $EC_{50}$ (95%置信区间) |
|---------------|---------------------|
| 1,2-环氧丁烷(g/L) | 0.58(0.44-0.72)     |
| 1,2-丁二醇(g/L)  | 18.66(0.00-51.29)   |
| 甲基丙烯醛(mg/L)   | 8.91(0.00-23.62)    |
| 甲基丙烯酸(mg/L)   | 57.36(0.00-159.98)  |

压耐受限制,浓度-效应曲线难以覆盖完整的完全抑制效应范围。这种基于管理风险权衡而未盲目拓展暴露浓度范围的操作,在外推拟合时导致了区间变宽,但其 $EC_{50}$ 绝对量级明确,不影响后续风险阈值(PNEC)推导的整体可靠性。

## 2.2 模型补充试验数据

基于本模型的技术,通过毒性数据库、ICE模型外推、毒性试验和QSAR计算四种手段补充完善了工艺涉及的26种特征污染物急性毒性数据300余条。所有工艺特征污染物毒性数据量满足《淡水生物水质基准推导技术指南(HJ 831-2022)》构建SSD最小数据量要求。表7详述了情境二下利用ICE模型外推得到的毒性数据不足的特征污染物的急性毒性数据。表S1展示了本研究选取的种间相关估计(ICE)模型及其相关参数,结果表明,所有入选模型的決定系数( $R^2$ )均大于0.6,均方误差(MSE)均低0.95,表明所选种间外推模型不仅拟合优度高,且具备极强的外部泛化预测能力,可有效保障后续多情境SSD拟合的输入数据质量。本研究以原有物种的毒性数据为基准,通过建立原有物种与预测物种间的普通最小二乘回归模型,实现了毒性效应从已知物种向更多潜在物种的外推与扩展。

表S2详述了使用QSAR-ICE模型预测得到的急性毒性数据。对于毒性数据缺失的特征污染物,本研究采用Transformer-DNN深度学习模型预测其对典型水生生物的急性毒性值。该模型在大规模水生毒性数据库上经过系统性预训练,展现出优异的预测性能。文献验证结果表明,针对藻类、溞类和鱼类三大受试类群,模型在独立测试集上的相关系数( $r$ )为0.64、0.73、0.69,均方根误差(RMSE)显著低于传统QSAR工具<sup>[20]</sup>。这种高精度拟合能力确保了其产生的模拟毒性数据能够作为SSD模型构建的可靠输入源。

结果显示,该模型能够精准预测并覆盖藻溞鱼

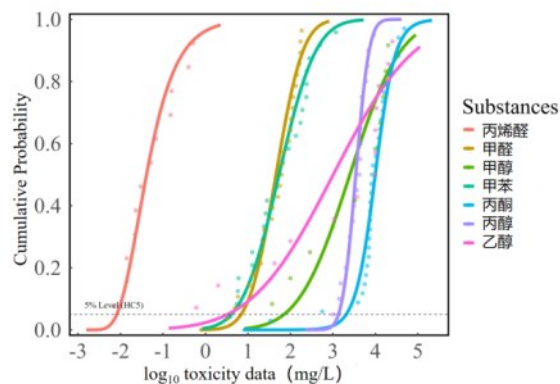
三大核心受试类群,分别代表了水生生态系统中的初级生产者、初级消费者和高级消费者。

表S3汇总了综合运用毒性试验-QSAR-ICE-SSD模型预测得到的急性毒性数据,其中,初级生产者(藻类)和初级消费者(溞类)的毒性数据通过实测毒性试验补充获取,高级消费者(鱼类)的急性毒性数据则通过QSAR模型进行补充预测,从而构建了覆盖多营养层级的完整毒性数据集,为后续SSD模型的构建提供了坚实的数据基础。

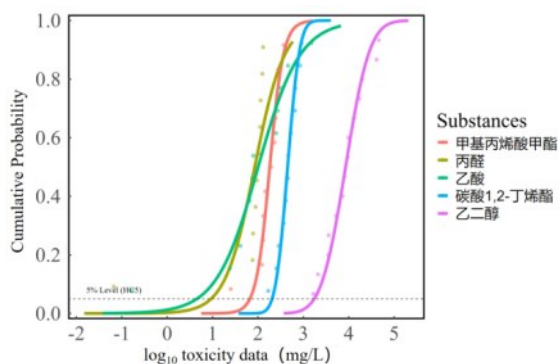
## 2.3 生态效应评估

在完成基于QSAR的基础毒性预测、基于毒性试验的数据扩充与基于ICE的数据扩充(表7、S1、S2)后,生态风险评估的急性毒性数据已经完善。为了将这些急性毒性数据转化为可用于环境管理的定量风险阈值,通过物种敏感性分布(SSD)模型推导计算出 $HC_5$ 。

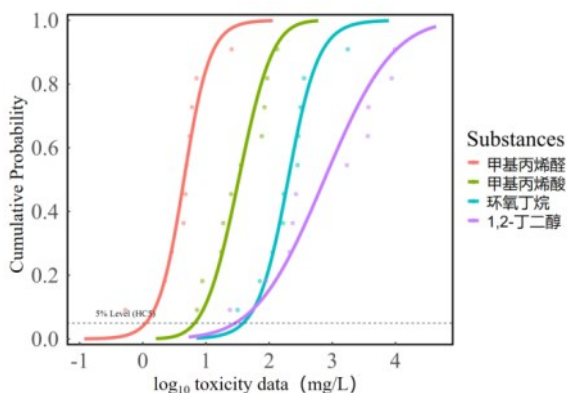
为确保26种化工原料环境风险评价的科学性,本研究在使用SSD模型时采用了多函数拟合并行优选策略。针对每种化学物质的急性毒性数据集,并非强制使用同一种函数,而是根据赤池信息准则(AIC)为每种化工原料匹配了最适合其毒性数据特征的概率分布模型。图3展示了多情境下基于急性毒性数据绘制的SSD图。可以看出26种物质的曲线分布呈现出明显的层级梯度。位于图像最左侧的曲线(如图3(a)中的丙烯醛)代表了极高毒性物质,其 $HC_5$ 极低;而位于最右侧的曲线(如图3(b)中的乙二醇)则体现了生态友好性。不同曲线的斜率(Slope)反映了物种间敏感度的差异。曲线斜率越陡峭,说明不同生物对该物质的响应越趋同;斜率越平缓,说明该物质对不同分类受体的选择性毒性越强。图3(a)中的乙醇斜率平缓,表明该物质对不同分类受体的选择毒性较强。



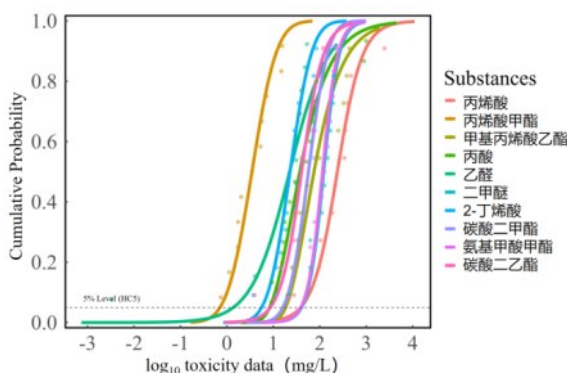
(a) 情境1:毒性数据充足(SSD)



(b) 情境2:毒性数据不足(ICE-SSD)



(c) 情境3:毒性数据缺失(QSAR-ICE-SSD)



(d) 情境4:毒性数据缺失(毒性试验-QSAR-ICE-SSD)

图3 多情境下基于急性毒性数据的SSD图

Fig.3 SSD graph based on acute toxicity data across multiple scenarios

基于拟合获得的SSD曲线,可以获取26种物质的急性毒性 $HC_5$ 。根据1.1中所述公式(1),进一步推导计算PNEC。在确定评估因子(AF)时,参考《淡水生物水质基准推导技术指南(HJ 831-2022)》,综合评估数据样本量、物种结构和模型拟合优度等因素,本研究中AF取值设定为2。最终推导出的PNEC值如表10所示。

为估算26种化工原料的慢性环境风险,本研究

采用毒性急慢性比法(ACR)获取慢性毒性PNEC。

$$PNEC_{\text{chronic}} = \frac{PNEC_{\text{acute}}}{ACR} \quad (4)$$

现有研究表明,针对溞类及鱼类等典型受试生物,当评估因子(AF)设为100时,该外推模型对逾90%的通用工业化学品具有足够的保护水平<sup>[26]</sup>,符合相关技术规范建议。尽管,藻类(初级生产者)因其生命周期短,急慢性毒性效应阈值较为接近,其ACR值通常较低( $<10$ )<sup>[27]</sup>,但考虑到本研究涉及的化学品种类较多,为确保风险评估结果的保守性并统一评价标准,本文选取评估因子(AF)为100作为该物质的毒性急慢性比(ACR),用于由急性PNEC进一步推导慢性PNEC具体计算结果如表8所示。

## 2.4 最大允许排放浓度的计算

基于预测无效应浓度(PNEC)反向推导最大允许排放浓度时,采用公式(5)进行计算。

$$C_{\text{allow}} = PNEC_{\text{chronic}} \times DF \quad (5)$$

根据欧盟ECHA发布的技术指南,淡水环境的默认稀释因子为10。考虑到本研究涉及多类化学品且缺乏现场特定水文数据,为统一评价标准并确保风险评估的保守性,本文选取 $DF = 10$ 作为淡水环境的稀释因子,与指南的默认设置一致。通过上述公式,进一步推算出26种化学品的最大允许排放浓度( $C_{\text{allow}}$ ),结果如图4所示。

从图中可以看出,不同化学物质的 $C_{\text{allow}}$ 呈现出显著的量级差异,这反映了不同化学物质对水生生物毒性的敏感性影响不同。丙酮、乙二醇及丙醇的 $C_{\text{allow}}$ 值较高,分别为103.0 mg/L、75.4 mg/L和67.5 mg/L。这表明此类物质对水生生态系统的潜在慢性风险相对较低,在排放管控中具有较大的容量空间。绝大多数化合物的 $C_{\text{allow}}$ 均处于较低水平,普遍小于5 mg/L,部分物质甚至接近于零。尤其是含有不饱和键(如丙烯醛、丙烯酸酯类)或活泼醛基的化合物,其 $C_{\text{allow}}$ 极低,说明此类物质在急性至慢性的长期暴露中表现出强烈的生物毒性。对于 $C_{\text{allow}}$ 较低的极性物质,在化工废水处理流程中应予以重点关注,必须确保出水浓度严格低于图示限值,以规避对受纳水体中溞类、鱼类及藻类等敏感生物的长期生态效应。

## 2.5 综合讨论

2.5.1 乙酸急性毒性数据的ICE扩充效果评价:为验证跨物种相关性估计(ICE)模型对毒性数据缺失的扩充效果,本研究选取乙酸作为参考,对比分析了基于原始数据与ICE扩展数据构建的SSD

表 7 ICE 模型预测得到急性毒性数据  
Table 7 Acute toxicity data were predicted by ICE model

| 化学品名称      | 物种名称                                   | 物种类型        | 毒性值(mg/L) |
|------------|----------------------------------------|-------------|-----------|
| 甲基丙烯酸甲酯    | 鲤鱼( <i>Cyprinus carpio</i> )           | Fish        | 194.88    |
|            | 斑点叉尾鲷( <i>Ictalurus punctatus</i> )    | Fish        | 122.98    |
|            | 大口黑鲈( <i>Micropterus salmoides</i> )   | Fish        | 244.64    |
|            | 虹鳟( <i>Oncorhynchus mykiss</i> )       | Fish        | 131.44    |
|            | 河鲈( <i>Perca flavescens</i> )          | Fish        | 130.81    |
|            | 美洲红点鲑( <i>Salvelinus fontinalis</i> )  | Fish        | 144.95    |
|            | 褐鳟( <i>Salmo trutta</i> )              | Fish        | 25.16     |
| 丙醛         | 网纹溞( <i>Ceriodaphnia dubia</i> )       | Fish        | 88.71     |
|            | 蚤状溞( <i>Daphnia pulex</i> )            | Fish        | 112.37    |
|            | 鲫鱼( <i>Carassius auratus</i> )         | Fish        | 94.45     |
|            | 鲤鱼( <i>Cyprinus carpio</i> )           | Fish        | 114.83    |
|            | 斑点叉尾鲷( <i>Ictalurus punctatus</i> )    | Fish        | 77.82     |
|            | 虹鳟( <i>Oncorhynchus mykiss</i> )       | Fish        | 76        |
|            | 黑头呆鱼( <i>Pimephales promelas</i> )     | Fish        | 103.14    |
| 乙酸         | 扁尾溞( <i>Thamnocephalus platyurus</i> ) | Crustaceans | 41        |
|            | 春池仙女虾( <i>Branchinecta lynchi</i> )    | Crustaceans | 45.3      |
|            | 丛枝溞( <i>Pseudosida ramosa</i> )        | Crustaceans | 23.96     |
| 碳酸 1,2-丁烯酯 | 网纹溞( <i>Ceriodaphnia dubia</i> )       | Crustaceans | 653.13    |
|            | 蚤状溞( <i>Daphnia pulex</i> )            | Crustaceans | 845.03    |
|            | 蓝鳃太阳鱼( <i>Lepomis macrochirus</i> )    | Fish        | 411.87    |
|            | 褐鳟( <i>Salmo trutta</i> )              | Fish        | 466.32    |
|            | 斑点叉尾鲷( <i>Ictalurus punctatus</i> )    | Fish        | 286.09    |
|            | 鲤鱼( <i>Cyprinus carpio</i> )           | Fish        | 528.73    |
|            | 鲫鱼( <i>Carassius auratus</i> )         | Fish        | 664       |
|            | 湖红点鲑( <i>Salvelinus namaycush</i> )    | Fish        | 168.06    |
|            | 大口黑鲈( <i>Micropterus salmoides</i> )   | Fish        | 255.47    |
|            | 河鲈( <i>Perca flavescens</i> )          | Fish        | 368.67    |
| 乙二醇        | 鲫鱼( <i>Carassius auratus</i> )         | Fish        | 3615.58   |
|            | 鲤鱼( <i>Cyprinus carpio</i> )           | Fish        | 9495.69   |
|            | 斑点叉尾鲷( <i>Ictalurus punctatus</i> )    | Fish        | 3549.68   |
|            | 大口黑鲈( <i>Micropterus salmoides</i> )   | Fish        | 19740.07  |
|            | 虹鳟( <i>Oncorhynchus mykiss</i> )       | Fish        | 7355.39   |
|            | 河鲈( <i>Perca flavescens</i> )          | Fish        | 7981.6    |
|            | 黑头呆鱼( <i>Pimephales promelas</i> )     | Fish        | 5268.1    |
|            | 河鳟( <i>Salvelinus fontinalis</i> )     | Fish        | 9859.4    |

曲线。

如图 5 所示,ICE 方法在本研究中表现出较高的可靠性。图中使用 ICE 补充数据与未使用 ICE 补充数据的两条累积分布曲线在整个浓度范围内几乎完全重合,特别是在数据密集的中浓度区域( $1 < \log_{10} < 3$ )两者贴合度极高,且 HC<sub>5</sub> 水平线的交点位置非常接近,表明 ICE 估算未显著改变原始数据的统计分布特征,关键生态阈值的估算结果保持稳

定。同时,ICE 方法有效填补了高浓度区域的数据空白,使分布曲线呈现更合理的渐近趋势,避免了因数据截断导致的分布畸变,补充数据符合毒性数据的对数正态分布规律,未出现明显异常值。这种高度一致性说明 ICE 方法基于种间毒性相关性的估算具有良好的统计稳健性和毒理学合理性,在数据有限的生态风险评估中,合理使用 ICE 补充种间毒性数据能够有效提高物种敏感性分布的完整性,为

表8 代表性化学物质预测无效应PNEC值

Table 8 Representative chemical substances predicted no effect PNEC value

| 序号 | 化学品名称      | PNEC <sub>acute</sub> (mg/L) | PNEC <sub>chronic</sub> (mg/L) |
|----|------------|------------------------------|--------------------------------|
| 1  | 甲基丙烯醛      | 0.47                         | 0.0047                         |
| 2  | 甲基丙烯酸      | 3.32                         | 0.0332                         |
| 3  | 甲基丙烯酸甲酯    | 28.45                        | 0.2845                         |
| 4  | 丙烯酸        | 16.1                         | 0.1610                         |
| 5  | 丙烯酸甲酯      | 0.36                         | 0.0036                         |
| 6  | 甲基丙烯酸乙酯    | 7.2                          | 0.0720                         |
| 7  | 丙酸         | 2.34                         | 0.0234                         |
| 8  | 丙烯醛        | 0.0027                       | 0.000027                       |
| 9  | 丙醛         | 4.76                         | 0.0476                         |
| 10 | 甲醛         | 2.97                         | 0.0297                         |
| 11 | 甲醇         | 35.55                        | 0.3555                         |
| 12 | 甲苯         | 1.93                         | 0.0193                         |
| 13 | 乙酸         | 0.995                        | 0.00995                        |
| 14 | 乙醛         | 4.19                         | 0.0419                         |
| 15 | 二甲醚        | 17.95                        | 0.1795                         |
| 16 | 丙酮         | 1030                         | 10.30                          |
| 17 | 2-丁烯酸      | 2.81                         | 0.0281                         |
| 18 | 丙醇         | 675                          | 6.7500                         |
| 19 | 碳酸 1,2-丁烯酯 | 101.5                        | 1.0150                         |
| 20 | 环氧丁烷       | 19.5                         | 0.1950                         |
| 21 | 碳酸二甲酯      | 8.35                         | 0.0835                         |
| 22 | 1,2-丁二醇    | 14.65                        | 0.1465                         |
| 23 | 氨基甲酸甲酯     | 18.1                         | 0.1810                         |
| 24 | 甲醇         | 35.55                        | 0.3555                         |
| 25 | 乙醇         | 7.5                          | 0.0750                         |
| 26 | 乙二醇        | 754.5                        | 7.545                          |
| 27 | 碳酸二乙酯      | 3.78                         | 0.0378                         |

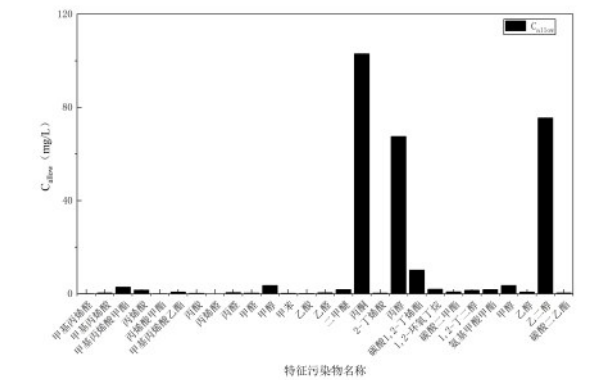


图4 代表性化学物质的最大允许排放浓度 ( $C_{allow}$ )

Fig.4 The maximum allowable emission concentration ( $C_{allow}$ ) of representative chemicals

风险评估提供可靠的数据支持。

2.5.2 不确定性分析:本研究在四种情境下对 26

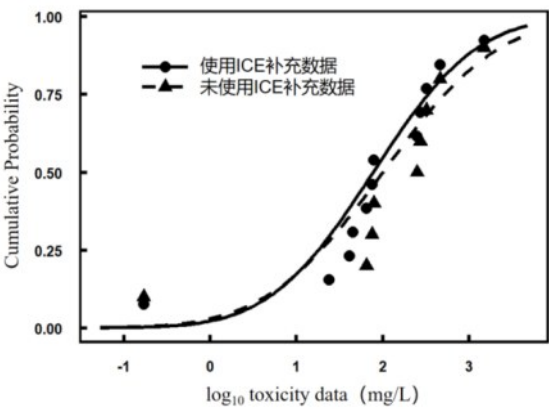


图5 乙酸急性毒性数据有无使用ICE模型对比图

Fig.5 Acetic acid acute toxicity data comparison chart using the ICE model

种特征污染物的急、慢性毒性进行了SSD曲线模拟。尽管本研究尝试多种手段提升了评估的统计稳健性,但受多方面因素影响,结果仍存在一定的不确定性<sup>[9]</sup>。其不确定性主要源于:情境4中QSAR模型模拟数据虽具有较高的拟合精度,但计算毒理学方法本质上仍存在系统误差;ICE方法基于分类学亲缘关系进行种间外推,虽然有效扩充了物种谱系,但可能忽略特定物种因生理代谢差异产生的敏感性响应变异<sup>[28]</sup>;此外,实验室受控条件下的毒性终点与复杂真实水生生态系统间存在生态外推偏差,且小样本数据集在SSD模型构建过程中可能产生统计波动<sup>[29]</sup>。

然而,SSD模型本身基于概率统计原理,通过多物种数据的累积概率分布拟合来推导 $HC_5$ 。个别物种预测值的偏差在经过QSAR-ICE扩展和SSD概率曲线拟合后,对整体 $HC_5$ 预测影响较小。与此同时,考虑到模型预测及生态外推过程仍可能带来风险低估,本研究在PNEC推导过程中采用了相对保守的评估因子(AF)和急慢性比(ACR)参数设置,以提高生态安全阈值的保护水平。

针对上述因素,本研究通过构建涵盖生产者(藻类)、初级消费者(溞类)及高级消费者(鱼类)的完备营养层级结构,有效规避了由于受试受体单一导致的风险表征偏差。同时,本研究采用了SSD模型拟合优度检验、Bootstrap重采样计算置信区间以及最小样本量计算等方法手段<sup>[10]</sup>,确保了多情境下推导出的生态安全阈值处于科学可接受的置信范围,从而为化学工业特征污染物的风险分级管理提供了可靠支撑。

3 结论

(1)本研究成功构建了适用于数据稀缺情境的QSAR-ICE-SSD集成评估框架,通过四种技术路线的灵活适配,实现了对26种MMA和BO工艺特征污染物的全覆盖生态风险评估,为复杂工业化学品生态风险量化提供了可操作的技术路径。

(2)多情境评估结果表明,丙烯醛、丙烯酸甲酯、甲基丙烯醛等物质具有极高的水生生态毒性(急性 $HC_5 < 1\text{ mg/L}$ ),需纳入优先管控清单;而丙酮、碳酸1,2-丁烯酯、乙二醇等物质生态风险较低,可作为绿色工艺优化的潜在替代溶剂。

(3)ICE外推显著提升了SSD数据完整性与统

计稳健性,使 $HC_5$ 估算结果更趋保守;QSAR与Transformer-DNN模型为数据缺失条件下的毒性补充提供了可靠支撑。采用统一 $ACR=100$ 推导慢性PNEC,确保了风险阈值的保守性与可比性。

(4)不同工艺路径对应污染物呈现清晰风险等级差异,应对高风险物质实施源头替代或严格过程控制,并结合 $HC_5$ 与PNEC阈值优化分级排放管理策略。

(5)尽管多源数据融合降低了不确定性,但QSAR预测误差、ICE种间外推偏差及实验室与自然生态差异仍可能影响风险精度。未来需结合现场监测与慢性毒性实验,并引入贝叶斯SSD框架以进一步提升不确定性量化能力。

表S2 QSAR-ICE模型预测得到急性毒性数据

Table S2 Acute toxicity data were predicted by QSAR-ICE model.

| 化学品名称   | 物种名称                                     | 物种类型        | 毒性值(mg/L) | 暴露时间(天) | 数据来源    |
|---------|------------------------------------------|-------------|-----------|---------|---------|
| 丙烯酸     | 黑头呆鱼( <i>Pimephales promelas</i> )       | Fish        | 409.28    | 4       | QSAR 计算 |
|         | 大型蚤( <i>Daphnia magna</i> )              | Crustaceans | 340.07    | 2       | QSAR 计算 |
|         | 羊角月牙藻( <i>Raphidocelis subcapitata</i> ) | Algae       | 96        | 4       | QSAR 计算 |
|         | 斑点叉尾鲷( <i>Ictalurus punctatus</i> )      | Fish        | 353.17    |         | ICE 模型  |
|         | 鲫鱼( <i>Carassius auratus</i> )           | Fish        | 471.13    |         | ICE 模型  |
|         | 扁尾蚤( <i>Thamnocephalus platyurus</i> )   | Crustaceans | 185.37    |         | ICE 模型  |
|         | 春池仙女虾( <i>Branchinecta lynchi</i> )      | Crustaceans | 215.75    |         | ICE 模型  |
|         | 丛枝蚤( <i>Pseudosida ramosa</i> )          | Crustaceans | 103.71    |         | ICE 模型  |
| 丙烯酸甲酯   | 黑头呆鱼( <i>Pimephales promelas</i> )       | Fish        | 5.629     | 4       | QSAR 计算 |
|         | 大型蚤( <i>Daphnia magna</i> )              | Crustaceans | 2.04      | 2       | QSAR 计算 |
|         | 羊角月牙藻( <i>Raphidocelis subcapitata</i> ) | Algae       | 14.94     | 4       | QSAR 计算 |
|         | 褐鲟( <i>Salmo trutta</i> )                | Fish        | 0.74      |         | ICE 模型  |
|         | 斑点叉尾鲷( <i>Ictalurus punctatus</i> )      | Fish        | 5.326     |         | ICE 模型  |
|         | 鲫鱼( <i>Carassius auratus</i> )           | Fish        | 7.15      |         | ICE 模型  |
|         | 孔雀花鲈( <i>Poecilia reticulata</i> )       | Fish        | 3.48      |         | ICE 模型  |
|         | 扁尾蚤( <i>Thamnocephalus platyurus</i> )   | Crustaceans | 1.75      |         | ICE 模型  |
|         | 春池仙女虾( <i>Branchinecta lynchi</i> )      | Crustaceans | 1.73      |         | ICE 模型  |
| 甲基丙烯酸乙酯 | 丛枝蚤( <i>Pseudosida ramosa</i> )          | Crustaceans | 1.12      |         | ICE 模型  |
|         | 黑头呆鱼( <i>Pimephales promelas</i> )       | Fish        | 380.35    | 4       | QSAR 计算 |
|         | 大型蚤( <i>Daphnia magna</i> )              | Crustaceans | 53.25     | 2       | QSAR 计算 |
|         | 羊角月牙藻( <i>Raphidocelis subcapitata</i> ) | Algae       | 25.3      | 4       | QSAR 计算 |
|         | 褐鲟( <i>Salmo trutta</i> )                | Fish        |           |         | ICE 模型  |
|         | 斑点叉尾鲷( <i>Ictalurus punctatus</i> )      | Fish        | 328.73    |         | ICE 模型  |
|         | 鲫鱼( <i>Carassius auratus</i> )           | Fish        | 438.57    |         | ICE 模型  |
|         | 孔雀花鲈( <i>Poecilia reticulata</i> )       | Fish        | 99.08     |         | ICE 模型  |
|         | 扁尾蚤( <i>Thamnocephalus platyurus</i> )   | Crustaceans | 34.18     |         | ICE 模型  |
| 丙酸      | 春池仙女虾( <i>Branchinecta lynchi</i> )      | Crustaceans | 37.53     |         | ICE 模型  |
|         | 丛枝蚤( <i>Pseudosida ramosa</i> )          | Crustaceans | 20.09     |         | ICE 模型  |
|         | 黑头呆鱼( <i>Pimephales promelas</i> )       | Fish        | 69.15     | 4       | QSAR 计算 |
|         | 羊角月牙藻( <i>Raphidocelis subcapitata</i> ) | Algae       | 17.7      | 4       | QSAR 计算 |

续表

| 化学品名称  | 物种名称                                     | 物种类型        | 毒性值(mg/L) | 暴露时间(天) | 数据来源    |
|--------|------------------------------------------|-------------|-----------|---------|---------|
|        | 褐鲟( <i>Salmo trutta</i> )                | Fish        | 9.05      |         | ICE 模型  |
|        | 斑点叉尾鲷( <i>Ictalurus punctatus</i> )      | Fish        | 62        |         | ICE 模型  |
|        | 鲫鱼( <i>Carassius auratus</i> )           | Fish        | 82.93     |         | ICE 模型  |
|        | 孔雀花鲈( <i>Poecilia reticulata</i> )       | Fish        | 29.38     |         | ICE 模型  |
|        | 扁尾蚤( <i>Thamnocephalus platyurus</i> )   | Crustaceans | 15.71     |         | ICE 模型  |
|        | 春池仙女虾( <i>Branchinecta lynchi</i> )      | Crustaceans | 16.79     |         | ICE 模型  |
|        | 丛枝蚤( <i>Pseudosida ramosa</i> )          | Crustaceans | 9.44      |         | ICE 模型  |
|        | 羊角月牙藻( <i>Raphidocelis subcapitata</i> ) | Alage       | 40.33     | 4       | QSAR 计算 |
| 乙 醛    | 扁尾蚤( <i>Thamnocephalus platyurus</i> )   | Crustaceans | 31.24     |         | ICE 模型  |
|        | 春池仙女虾( <i>Branchinecta lynchi</i> )      | Crustaceans | 34.19     |         | ICE 模型  |
|        | 丛枝蚤( <i>Pseudosida ramosa</i> )          | Crustaceans | 18.41     |         | ICE 模型  |
|        | 褐鲟( <i>Salmo trutta</i> )                | Fish        | 4.04      |         | ICE 模型  |
|        | 斑点叉尾鲷( <i>Ictalurus punctatus</i> )      | Fish        | 28.1      |         | ICE 模型  |
|        | 鲫鱼( <i>Carassius auratus</i> )           | Fish        | 37.63     |         | ICE 模型  |
|        | 孔雀花鲈( <i>Poecilia reticulata</i> )       | Fish        | 14.77     |         | ICE 模型  |
|        | 黑头呆鱼( <i>Pimephales promelas</i> )       | Fish        | 169.08    | 4       | QSAR 计算 |
| 二甲醚    | 大型蚤( <i>Daphnia magna</i> )              | Crustaceans | 192.73    | 2       | QSAR 计算 |
|        | 羊角月牙藻( <i>Raphidocelis subcapitata</i> ) | Algae       | 214.46    | 4       | QSAR 计算 |
|        | 褐鲟( <i>Salmo trutta</i> )                | Fish        | 22.11     |         | ICE 模型  |
|        | 斑点叉尾鲷( <i>Ictalurus punctatus</i> )      | Fish        | 148.7     |         | ICE 模型  |
|        | 鲫鱼( <i>Carassius auratus</i> )           | Fish        | 198.63    |         | ICE 模型  |
|        | 孔雀花鲈( <i>Poecilia reticulata</i> )       | Fish        | 62.81     |         | ICE 模型  |
|        | 扁尾蚤( <i>Thamnocephalus platyurus</i> )   | Crustaceans | 110.45    |         | ICE 模型  |
|        | 春池仙女虾( <i>Branchinecta lynchi</i> )      | Crustaceans | 126.27    |         | ICE 模型  |
| 2-丁烯酸  | 丛枝蚤( <i>Pseudosida ramosa</i> )          | Crustaceans | 62.73     |         | ICE 模型  |
|        | 黑头呆鱼( <i>Pimephales promelas</i> )       | Fish        | 28.65     | 4       | QSAR 计算 |
|        | 大型蚤( <i>Daphnia magna</i> )              | Crustaceans | 84.3      | 2       | QSAR 计算 |
|        | 羊角月牙藻( <i>Raphidocelis subcapitata</i> ) | Algae       | 73.83     | 4       | QSAR 计算 |
|        | 褐鲟( <i>Salmo trutta</i> )                | Fish        | 3.76      |         | ICE 模型  |
|        | 斑点叉尾鲷( <i>Ictalurus punctatus</i> )      | Fish        | 26.18     |         | ICE 模型  |
|        | 鲫鱼( <i>Carassius auratus</i> )           | Fish        | 35.06     |         | ICE 模型  |
|        | 孔雀花鲈( <i>Poecilia reticulata</i> )       | Fish        | 13.89     |         | ICE 模型  |
| 碳酸二甲酯  | 扁尾蚤( <i>Thamnocephalus platyurus</i> )   | Crustaceans | 19.42     |         | ICE 模型  |
|        | 春池仙女虾( <i>Branchinecta lynchi</i> )      | Crustaceans | 20.91     |         | ICE 模型  |
|        | 丛枝蚤( <i>Pseudosida ramosa</i> )          | Crustaceans | 11.6      |         | ICE 模型  |
|        | 黑头呆鱼( <i>Pimephales promelas</i> )       | Fish        | 88.76     | 4       | QSAR 计算 |
|        | 大型蚤( <i>Daphnia magna</i> )              | Crustaceans | 76.52     | 2       | QSAR 计算 |
|        | 羊角月牙藻( <i>Raphidocelis subcapitata</i> ) | Algae       | 221.8     | 4       | QSAR 计算 |
|        | 褐鲟( <i>Salmo trutta</i> )                | Fish        | 11.62     |         | ICE 模型  |
|        | 斑点叉尾鲷( <i>Ictalurus punctatus</i> )      | Fish        | 79.15     |         | ICE 模型  |
| 氨基甲酸甲酯 | 鲫鱼( <i>Carassius auratus</i> )           | Fish        | 105.83    |         | ICE 模型  |
|        | 孔雀花鲈( <i>Poecilia reticulata</i> )       | Fish        | 36.32     |         | ICE 模型  |
|        | 扁尾蚤( <i>Thamnocephalus platyurus</i> )   | Crustaceans | 47.57     |         | ICE 模型  |
|        | 春池仙女虾( <i>Branchinecta lynchi</i> )      | Crustaceans | 52.83     |         | ICE 模型  |
|        | 丛枝蚤( <i>Pseudosida ramosa</i> )          | Crustaceans | 27.69     |         | ICE 模型  |
|        | 黑头呆鱼( <i>Pimephales promelas</i> )       | Fish        | 169.08    | 4       | QSAR 计算 |

|       |                                          |             |           |         | 续表      |
|-------|------------------------------------------|-------------|-----------|---------|---------|
| 化学品名称 | 物种名称                                     | 物种类型        | 毒性值(mg/L) | 暴露时间(天) | 数据来源    |
| 碳酸二乙酯 | 大型溞( <i>Daphnia magna</i> )              | Crustaceans | 192.73    | 2       | QSAR 计算 |
|       | 羊角月牙藻( <i>Raphidocelis subcapitata</i> ) | Algae       | 215.25    | 4       | QSAR 计算 |
|       | 褐鳟( <i>Salmo trutta</i> )                | Fish        | 22.11     |         | ICE 模型  |
|       | 斑点叉尾鲷( <i>Ictalurus punctatus</i> )      | Fish        | 148.7     |         | ICE 模型  |
|       | 鲫鱼( <i>Carassius auratus</i> )           | Fish        | 198.63    |         | ICE 模型  |
|       | 孔雀花鲈( <i>Poecilia reticulata</i> )       | Fish        | 62.81     |         | ICE 模型  |
|       | 扁尾溞( <i>Thamnocephalus platyurus</i> )   | Crustaceans | 110.45    |         | ICE 模型  |
|       | 春池仙女虾( <i>Branchinecta lynchi</i> )      | Crustaceans | 126.27    |         | ICE 模型  |
|       | 丛枝溞( <i>Pseudosida ramosa</i> )          | Crustaceans | 62.73     |         | ICE 模型  |
|       | 黑头呆鱼( <i>Pimephales promelas</i> )       | Fish        | 30.15     | 4       | QSAR 计算 |
|       | 大型溞( <i>Daphnia magna</i> )              | Crustaceans | 118.11    | 2       | QSAR 计算 |
|       | 羊角月牙藻( <i>Raphidocelis subcapitata</i> ) | Algae       | 92.33     | 4       | QSAR 计算 |
|       | 褐鳟( <i>Salmo trutta</i> )                | Fish        | 3.95      |         | ICE 模型  |
|       | 斑点叉尾鲷( <i>Ictalurus punctatus</i> )      | Fish        | 27.52     |         | ICE 模型  |
|       | 鲫鱼( <i>Carassius auratus</i> )           | Fish        | 36.85     |         | ICE 模型  |
|       | 孔雀花鲈( <i>Poecilia reticulata</i> )       | Fish        | 14.51     |         | ICE 模型  |
|       | 扁尾溞( <i>Thamnocephalus platyurus</i> )   | Crustaceans | 70.67     |         | ICE 模型  |
|       | 春池仙女虾( <i>Branchinecta lynchi</i> )      | Crustaceans | 79.56     |         | ICE 模型  |
|       | 丛枝溞( <i>Pseudosida ramosa</i> )          | Crustaceans | 40.66     |         | ICE 模型  |

符 号 说 明

- X<sub>2</sub>——预测物种的毒性数据,如 LC<sub>50</sub>、EC<sub>50</sub>
- X<sub>1</sub>——替代物种的毒性数据,如 LC<sub>50</sub>、EC<sub>50</sub>
- a、b——方程拟合参数
- MEC——实测环境浓度
- PEC——预测环境浓度
- PNEC——预测无效应浓度
- HC<sub>5</sub>——95% 物种未受影响的浓度
- AF——评估因子
- RQ——环境风险商
- PNEC<sub>acute</sub>——急性毒性预测无效应浓度
- PNEC<sub>chronic</sub>——慢性毒性预测无效应浓度
- ACR——急慢性毒性比
- DF——稀释因子
- C<sub>allow</sub>——最大允许排放浓度

表 S1 本研究选取的种间相关估计(ICE)模型及其相关参数

Table S1 The Interspecies Correlation Estimation (ICE) model and its associated parameters selected for this study

| 替代物种(Surrogate Species)                 | 预测物种<br>(Predicted Species)                | 决定<br>系数<br>(R <sup>2</sup> ) | p-value  | Degrees<br>of<br>Freedom<br>(N-2) | 截距<br>(Intercept) | 斜率<br>(Slope) | 均方<br>误差<br>(MSE) | 分类学距离<br>(Taxonomic<br>Distance) | Cross-<br>validation<br>Success<br>(%) |
|-----------------------------------------|--------------------------------------------|-------------------------------|----------|-----------------------------------|-------------------|---------------|-------------------|----------------------------------|----------------------------------------|
| 大型蚤<br>( <i>Daphnia magna</i> )         | 春池仙女虾( <i>Branchinecta lynchi</i> )        | 0.98                          | 9.00E-06 | 5                                 | 0.116             | 0.943         | 0.074             | 5                                | 100                                    |
|                                         | 丛枝蚤<br>( <i>Pseudosida ramosa</i> )        | 0.87                          | 6.94E-03 | 4                                 | 0.118             | 0.885         | 0.564             | 3                                | 50                                     |
|                                         | 扁尾蚤<br>( <i>Thamnocephalus platyurus</i> ) | 0.97                          | 0.00E+00 | 18                                | 0.224             | 0.912         | 0.123             | 4                                | 95                                     |
|                                         | 网纹蚤<br>( <i>Ceriodaphnia dubia</i> )       | 0.95                          | 0.00E+00 | 40                                | -0.280            | 1.020         | 0.242             | 2                                | 83                                     |
|                                         | 蚤状蚤( <i>Daphnia pulex</i> )                | 0.96                          | 0.00E+00 | 40                                | -0.167            | 1.010         | 0.147             | 1                                | 95                                     |
|                                         | 假鳃毛虫<br>( <i>Pseudosida ramosa</i> )       | 0.87                          | 6.94E-03 | 4                                 | 0.118             | 0.885         | 0.564             | 3                                | 50                                     |
|                                         | 宽尾棘背枝节虫( <i>Thamnocephalus platyurus</i> ) | 0.97                          | 0.00E+00 | 18                                | 0.224             | 0.912         | 0.123             | 4                                | 95                                     |
|                                         |                                            |                               |          |                                   |                   |               |                   |                                  |                                        |
| 蓝鳃太阳鱼<br>( <i>Lepomis macrochirus</i> ) | 鲫鱼( <i>Carassius auratus</i> )             | 0.71                          | 0.00E+00 | 27                                | 0.977             | 0.779         | 0.515             | 4                                | 72                                     |
|                                         | 鲤鱼( <i>Cyprinus carpio</i> )               | 0.79                          | 0.00E+00 | 30                                | 0.605             | 0.862         | 0.466             | 4                                | 81                                     |
|                                         | 斑点叉尾鲷<br>( <i>Ictalurus punctatus</i> )    | 0.77                          | 0.00E+00 | 77                                | 0.744             | 0.812         | 0.435             | 4                                | 82                                     |
|                                         | 虹鳟<br>( <i>Oncorhynchus mykiss</i> )       | 0.89                          | 0.00E+00 | 314                               | 0.034             | 0.950         | 0.225             | 4                                | 91                                     |
|                                         | 黑头呆鱼<br>( <i>Pimephales promelas</i> )     | 0.81                          | 0.00E+00 | 108                               | 0.624             | 0.867         | 0.401             | 4                                | 81                                     |
|                                         |                                            |                               |          |                                   |                   |               |                   |                                  |                                        |
| 黑头呆鱼<br>( <i>Pimephales promelas</i> )  | 褐鳟( <i>Salmo trutta</i> )                  | 0.59                          | 3.52E-03 | 10                                | -0.875            | 0.998         | 0.966             | 4                                | 58                                     |
|                                         | 斑点叉尾鲷( <i>Ictalurus punctatus</i> )        | 0.87                          | 0.00E+00 | 52                                | 0.057             | 0.978         | 0.301             | 4                                | 85                                     |
|                                         | 鲫鱼( <i>Carassius auratus</i> )             | 0.94                          | 0.00E+00 | 26                                | 0.190             | 0.977         | 0.142             | 2                                | 93                                     |
|                                         | 孔雀花鳉( <i>Poecilia reticulata</i> )         | 0.78                          | 0.00E+00 | 27                                | 0.354             | 0.850         | 0.385             | 4                                | 66                                     |
| 虹鳟<br>( <i>Oncorhynchus mykiss</i> )    | 蓝鳃太阳鱼( <i>Lepomis macrochirus</i> )        | 0.89                          | 0.00E+00 | 314                               | 0.297             | 0.937         | 0.222             | 4                                | 90                                     |
|                                         | 褐鳟( <i>Salmo trutta</i> )                  | 0.97                          | 0.00E+00 | 20                                | 0.019             | 0.999         | 0.074             | 2                                | 100                                    |
|                                         | 斑点叉尾鲷( <i>Ictalurus punctatus</i> )        | 0.76                          | 0.00E+00 | 98                                | 0.819             | 0.817         | 0.498             | 4                                | 76                                     |
|                                         | 鲤鱼( <i>Cyprinus carpio</i> )               | 0.74                          | 0.00E+00 | 47                                | 0.923             | 0.805         | 0.516             | 4                                | 76                                     |
|                                         | 鲫鱼( <i>Carassius auratus</i> )             | 0.83                          | 0.00E+00 | 35                                | 1.110             | 0.816         | 0.487             | 4                                | 81                                     |
|                                         | 湖红点鲑( <i>Salvelinus namaycush</i> )        | 0.94                          | 0.00E+00 | 26                                | 0.230             | 0.894         | 0.072             | 2                                | 96                                     |
|                                         | 大口黑鲈( <i>Micropterus salmoides</i> )       | 0.89                          | 0.00E+00 | 32                                | 0.045             | 0.942         | 0.207             | 4                                | 91                                     |
|                                         | 河鲈( <i>Perca flavescens</i> )              | 0.77                          | 0.00E+00 | 23                                | 0.294             | 0.899         | 0.581             | 4                                | 84                                     |

表 S3 毒性试验-QSAR-ICE 模型预测得到急性毒性数据

Table S3 Acute toxicity data were predicted by toxicity test-QSAR-ICE model

| 化学品名称   | 物种名称                                       | 物种类型        | 毒性值(mg/L) | 暴露时间(天) | 数据来源    |
|---------|--------------------------------------------|-------------|-----------|---------|---------|
| 甲基丙烯酸   | 小球藻( <i>Chlorella sp.</i> )                | Alga        | 25.48     | 4       | 课题毒性试验  |
|         | 大型蚤( <i>Daphnia magna</i> )                | Crustaceans | 7.08      | 2       | 课题毒性试验  |
|         | 黑头呆鱼( <i>Pimephales promelas</i> )         | Fish        | 4.91      | 4       | QSAR 计算 |
|         | 春池神仙虾( <i>Branchinecta lynchi</i> )        | Crustaceans | 6.01      |         | ICE 模型  |
|         | 假鳃毛虫( <i>Pseudosida ramosa</i> )           | Crustaceans | 2.23      |         | ICE 模型  |
|         | 宽尾棘背枝节虫( <i>Thamnocephalus platyurus</i> ) | Crustaceans | 5.53      |         | ICE 模型  |
|         | 鲫鱼( <i>Carassius auratus</i> )             | Fish        | 4.74      |         | ICE 模型  |
|         | 斑点叉尾鲷( <i>Ictalurus punctatus</i> )        | Fish        | 4.42      |         | ICE 模型  |
|         | 孔雀花鳉( <i>Poecilia reticulata</i> )         | Fish        | 2.86      |         | ICE 模型  |
| 甲基丙烯酸   | 褐鲮( <i>Salmo trutta</i> )                  | Fish        | 0.53      |         | ICE 模型  |
|         | 小球藻( <i>Chlorella sp.</i> )                | Alga        | 133.57    | 4       | 课题毒性试验  |
|         | 大型蚤( <i>Daphnia magna</i> )                | Crustaceans | 25        | 2       | 课题毒性试验  |
|         | 黑头呆鱼( <i>Pimephales promelas</i> )         | Fish        | 93.32     | 4       | QSAR 计算 |
|         | 春池神仙虾( <i>Branchinecta lynchi</i> )        | Crustaceans | 18.74     |         | ICE 模型  |
|         | 假鳃毛虫( <i>Pseudosida ramosa</i> )           | Crustaceans | 7.23      |         | ICE 模型  |
|         | 宽尾棘背枝节虫( <i>Thamnocephalus platyurus</i> ) | Crustaceans | 17.55     |         | ICE 模型  |
|         | 鲫鱼( <i>Carassius auratus</i> )             | Fish        | 84.33     |         | ICE 模型  |
|         | 斑点叉尾鲷( <i>Ictalurus punctatus</i> )        | Fish        | 76.39     |         | ICE 模型  |
| 环氧丁烷    | 孔雀花鳉( <i>Poecilia reticulata</i> )         | Fish        | 35.75     |         | ICE 模型  |
|         | 褐鲮( <i>Salmo trutta</i> )                  | Fish        | 8.77      |         | ICE 模型  |
|         | 小球藻( <i>Chlorella sp.</i> )                | Alga        | 1760      | 4       | 课题毒性试验  |
|         | 大型蚤( <i>Daphnia magna</i> )                | Crustaceans | 290       | 2       | 课题毒性试验  |
|         | 黑头呆鱼( <i>Pimephales promelas</i> )         | Fish        | 358.12    | 4       | QSAR 计算 |
|         | 春池神仙虾( <i>Branchinecta lynchi</i> )        | Crustaceans | 170.53    |         | ICE 模型  |
|         | 假鳃毛虫( <i>Pseudosida ramosa</i> )           | Crustaceans | 71.13     |         | ICE 模型  |
|         | 宽尾棘背枝节虫( <i>Thamnocephalus platyurus</i> ) | Crustaceans | 165.64    |         | ICE 模型  |
|         | 鲫鱼( <i>Carassius auratus</i> )             | Fish        | 314.17    |         | ICE 模型  |
| 1,2-丁二醇 | 斑点叉尾鲷( <i>Ictalurus punctatus</i> )        | Fish        | 280.83    |         | ICE 模型  |
|         | 孔雀花鳉( <i>Poecilia reticulata</i> )         | Fish        | 113.36    |         | ICE 模型  |
|         | 褐鲮( <i>Salmo trutta</i> )                  | Fish        | 31.72     |         | ICE 模型  |
|         | 小球藻( <i>Chlorella sp.</i> )                | Alga        | 9790      | 4       | 课题毒性试验  |
|         | 大型蚤( <i>Daphnia magna</i> )                | Crustaceans | 8710      | 2       | 课题毒性试验  |
|         | 黑头呆鱼( <i>Pimephales promelas</i> )         | Fish        | 266.74    | 4       | QSAR 计算 |
|         | 春池神仙虾( <i>Branchinecta lynchi</i> )        | Crustaceans | 3656      |         | ICE 模型  |
|         | 假鳃毛虫( <i>Pseudosida ramosa</i> )           | Crustaceans | 1700      |         | ICE 模型  |
|         | 宽尾棘背枝节虫( <i>Thamnocephalus platyurus</i> ) | Crustaceans | 3738      |         | ICE 模型  |
| 1,2-丁二醇 | 鲫鱼( <i>Carassius auratus</i> )             | Fish        | 235.53    |         | ICE 模型  |
|         | 斑点叉尾鲷( <i>Ictalurus punctatus</i> )        | Fish        | 211.15    |         | ICE 模型  |
|         | 孔雀花鳉( <i>Poecilia reticulata</i> )         | Fish        | 88.04     |         | ICE 模型  |
|         | 褐鲮( <i>Salmo trutta</i> )                  | Fish        | 23.94     |         | ICE 模型  |

## 参考文献

- [1] Environmental Protection Agency U S. Guidelines for deriving numerical national water quality criteria for the protection of aquatic organisms and their uses: PB85-227049[R]. Washington, DC: Office of Research and Development, Environmental Protection Agency, 1985.
- [2] European Chemicals Agency. Guidance on information requirements and chemical safety assessment: Part E: risk

- characterisation[R]. European Chemicals Agency (ECHA), 2008.
- [3] Wheeler J R, Grist E P M, Leung K M Y, et al. Species sensitivity distributions: data and model choice[J]. *Marine Pollution Bulletin*, 2002, **45**(1-12): 192-202.
- [4] Hong Y J, Feng C L, Jin X W, 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.
- [5] Zhang J, Xiao J, Tao H, et al. Coupled In Silico Toxicology Models Reveal Equivalent Ecological Risks from BPA and Its Alternatives in Chinese Surface Waters[J]. *Toxics*, 2025, **13**(8): 671.
- [6] 冯承莲, 付卫强, Dyer Scott, 等. 种间关系预测(ICE)模型在水质基准研究中的应用[J]. *生态毒理学报*, 2015, **10**(1): 81-87.
- Feng C L, Fu W Q, Scott D, et al. Application of interspecies correlation estimation (ICE) models in the study of water quality criteria[J]. *Asian Journal of Ecotoxicology*, 2015, **10**(1): 81-87.
- [7] Raimondo S, Barron M G. Application of Interspecies Correlation Estimation (ICE) models and QSAR in estimating species sensitivity to pesticides[J]. *SAR and QSAR in Environmental Research*, 2020, **31**(1): 1-18.
- [8] Klimisch H J, Andreae M, Tillmann U. A systematic approach for evaluating the quality of experimental toxicological and ecotoxicological data[J]. *Regulatory Toxicology and Pharmacology*, 1997, **25**(1): 1-5.
- [9] Jin X W, Wang Y Y, Jin W, et al. Ecological risk of nonylphenol in China surface waters based on reproductive fitness[J]. *Environmental Science & Technology*, 2014, **48**(2): 1256-1262.
- [10] 张家玮, 齐观景, 赵昊铎, 等. 基于物种敏感性分布评价长三角地区地表水壬基酚生态风险[J]. *生态毒理学报*, 2020, **15**(3): 134-148.
- Zhang J W, Qi G J, Zhao H D, et al. Ecological risk assessment of nonylphenol in surface waters of the Yan-gtze River Delta based on species sensitivity distribution model[J]. *Asian Journal of Ecotoxicology*, 2020, **15**(3): 134-148.
- [11] Zhang J W, Zhang M T, Tao H Y, et al. A QSAR-ICE-SSD model prediction of the PNECs for per-and polyfluoroalkyl substances and their ecological risks in an area of electroplating factories[J]. *Molecules*, 2021, **26**(21): 6574.
- [12] Huang P, Liu S S, Wang Z J, et al. Deriving the predicted no effect concentrations of 35 pesticides by the QSAR-SSD method[J]. *Chemosphere*, 2022, **298**: 134303.
- [13] Tang W H, Chen J W, Wang Z Y, et al. Deep learning for predicting toxicity of chemicals: a mini review[J]. *Journal of Environmental Science and Health, Part C*, 2018, **36**(4): 252-271.
- [14] Ghorpade-Aher J, Saxena A, Inamdar M, et al. QSAR model for aquatic toxicity estimates using machine learning[C]//*Advances in Communication and Applications*. Singapore: Springer, 2025: 387-398.
- [15] 开小明, 付丽娟, 张谷鑫. 主成分线性回归分光光度法同时测定复方制剂中苯酚和间苯二酚[J]. *中国卫生检验杂志*, 2005(10): 1156-1157.
- Kai X M, Fu L J, Zhang G X. Spectrophotometric simultaneous determination of phenol and resorcinol in compound preparations by principal component linear regression method[J]. *Chinese Journal of Health Laboratory Technology*, 2005(10): 1156-1157.
- [16] 陈雅菲, 钟儒刚. QSAR 建模方法及其应用于化学物质毒性预测的研究进展[J]. *轻工科技*, 2017, **33**(2): 29-31.
- Chen Y F, Zhong R G. Recent Advances in QSAR Modeling Methods and Their Application in the Prediction of Chemical Toxicity [J]. *Light Industry Science and Technology*, 2017, **33**(2): 29-31.
- [17] Fuadah Y N, Pramudito M A, Firdaus L, et al. QSAR Classification modeling using machine learning with a consensus-based approach for multivariate chemical hazard end points[J]. *ACS Omega*, 2024, **9**(51): 50796-50808.
- [18] Wu K D, Wei G W. Quantitative toxicity prediction using topology based multitask deep neural networks[J]. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2018, **58**(2): 520-531.
- [19] Jain S, Siramshetty V B, Alves V M, et al. Large-scale modeling of multispecies acute toxicity end points using consensus of multitask deep learning methods[J]. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2021, **61**(2): 653-663.
- [20] Gustavsson M, Käll S, Svedberg P, et al. Transformers enable accurate prediction of acute and chronic chemical toxicity in aquatic organisms[J]. *Science Advances*, 2024, **10**(10): eadk6669.
- [21] Raimondo S, Lilavois C R, Nelson S L, et al. Evaluation of interspecies correlation estimation models to increase taxonomic diversity while reducing reliance on animal testing for chemicals evaluated under the Toxic Substances Control Act[J]. *Integrated Environmental Assessment and Management*, 2025, **21**(1): 184-194.
- [22] 曾勇, 孙霄, 赖雨薇, 等. 基于物种敏感性分布的多环芳烃水生态系统风险评估方法与应用[J]. *生态毒理学报*, 2020, **15**(5): 235-243.
- Zeng Y, Sun X, Lai Y W, et al. Aquatic ecosystem risk assessment of polycyclic aromatic hydrocarbons based on species sensitivity distribution [J]. *Asian Journal of Ecotoxicology*, 2020, **15**(5): 235-243.
- [23] 陈波宇, 郑斯瑞, 牛希成, 等. 物种敏感度分布及其在生态毒理学中的应用[J]. *生态毒理学报*, 2010, **5**(4): 491-497.
- Chen B Y, Zheng S R, Niu X C, et al. Species Sensitivity Distribution and Its Application in Ecotoxicology[J]. *Asian Journal of Ecotoxicology*, 2010, **5**(4): 491-497.
- [24] Zhao J S, Chen B Y. Species sensitivity distribution for chlorpyrifos to aquatic organisms: Model choice and sample size [J]. *Ecotoxicology and environmental safety*, 2016, **125**: 161-169.
- [25] 史江红, 谢容, 葛卉, 等. 一种用于水质基准推导的物种敏感性分布模型优化方法:202410567311.X[P].2024-08-06.
- Shi J H, Xie R, Ge H, et al. An Optimization Method for Species Sensitivity Distribution Models Used in Deriving Water Quality Standards:202410567311.X[P].2024-08-06.
- [26] May M, Drost W, Germer S, et al. Evaluation of acute-to-chronic ratios of fish and Daphnia to predict acceptable no-effect levels [J]. *Environmental Sciences Europe*, 2016, **28**(1): 16.
- [27] Ahlers J, Riedhammer C, Vogliano M, et al. Acute to chronic ratios in aquatic toxicity: variation across trophic levels and relationship with chemical structure[J]. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 2006, **25**(11): 2937-2945.
- [28] Tao H Y, Shi J H, Zhang J W, et al. ICE-SSD Model: Bridging the Ecological Risk Assessment Gap between Plasticizer and the Substitute[J]. *ACS ES&T Water*, 2025, **5**(2): 727-737.
- [29] Kamo M, Hayashi T I, Iwasaki Y. Revisiting assessment factors for species sensitivity distributions as a function of sample size and

---

variation in species sensitivity[J]. Ecotoxicology and Environmental Safety, 2022, **246**: 114170.