**化学物质环境与健康暴露评估技术规范**

**（试行）**

**2020年8月**

目录

[1 适用范围 1](#_Toc50124961)

[2 规范性引用文件 1](#_Toc50124962)

[3 术语和定义 1](#_Toc50124963)

[4 评估原则 3](#_Toc50124964)

[5 评估程序 3](#_Toc50124965)

[6 方案制定 4](#_Toc50124966)

[7 信息收集 7](#_Toc50124967)

[8 暴露场景构建 7](#_Toc50124968)

[9 排放估算 12](#_Toc50124969)

[10 环境暴露评估 17](#_Toc50124970)

[11 健康暴露评估 24](#_Toc50124971)

[12 暴露评估报告 26](#_Toc50124972)

[附录A （资料性附录） 化学物质环境排放系数 28](#_Toc50124973)

[附录B （资料性附录） 暴露参数推荐值 50](#_Toc50124974)

[附录C （资料性附录） 环境行为与归趋参数计算 53](#_Toc50124975)

[附录D （资料性附录） 基于C-STP（O）模型的化学物质在STP中的归趋和暴露估算 58](#_Toc50124976)

[附录E （规范性附录） 局部尺度环境暴露估算模型 65](#_Toc50124977)

[附录F （规范性附录） 局部尺度人体健康暴露估算模型 72](#_Toc50124978)

[附录G （资料性附录） 暴露估算工具（CET） 74](#_Toc50124979)

化学物质环境与健康暴露评估技术规范

（试行）

为指导化学物质的环境与健康暴露评估，制定本技术规范。

# 适用范围

本规范规定了化学物质环境与健康暴露评估原则、程序及方法，适用于新化学物质和现有化学物质的环境与健康暴露评估。

# 规范性引用文件

本规范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/T 34708 化学物质风险评估通则

HJ 2035 固体废物处理处置工程技术导则

新化学物质环境管理登记指南

化学物质环境风险评估技术方法框架性指南（试行）（环办固体〔2019〕54号）

化学物质环境与健康危害评估技术规范

# 术语和定义

## 生命周期

化学物质从产生到最终废弃的各个阶段，包括生产、配制、工业使用、消费使用和废物利用处置阶段等。

## 暴露场景

给定条件下用来辅助评估和量化受体暴露的一系列关于排放源和排放场景、暴露途径、暴露参数和暴露模型、暴露受体的事实、推定和假设。

## 环境暴露

给定暴露场景下，化学物质对环境中非人类受体的暴露。

## 健康暴露

在给定暴露场景下，化学物质进入环境后，一般人群经由环境的间接暴露。

## 排放源

向环境排放化学物质的源，包括工业源、消费源、废物利用处置源及集中式污水处理厂（STP）。

## 排放场景

关于化学物质在特定生命周期阶段或某个用途的环境排放情况，包括生产、使用等所涉及的操作条件与减排措施，如行业类型、主要活动、工艺过程、使用方式、关键参数、产排污环节及污染物产排量等的详细描述，用以估算化学物质特定生命阶段或特定用途的初始环境排放量。

## 暴露评估

确定化学物质的排放场景和暴露途径，并估算和测定环境生物和人体的暴露程度（浓度和剂量）。

环境暴露浓度指化学物质在大气、地表水、地下水、沉积物、土壤、STP微生物环境中的浓度，及捕食动物暴露浓度。人体暴露剂量指外暴露剂量。

## 暴露模型

描述受体对化学物质的暴露过程，估算暴露浓度和暴露量的概念模型及数学模拟方法。

## 暴露参数

用来描述环境和人体暴露特征和行为的参数。环境暴露参数包括环境尺度、气象、水文水质、沉积物与土壤理化特性等，人体暴露参数包括身体特征、摄入量、时间-活动模式等。

# 评估原则

## 科学性

基于合理假设，运用科学的理论与方法，结合我国特征的暴露参数开展暴露估算，确保评估结果的科学性、准确性和可靠性。

## 先进性

根据我国化学物质环境管理的要求，鼓励运用先进技术方法开展环境与健康暴露评估。

## 保守性

充分考虑化学物质暴露评估的不确定和变异性，基于“合理的最坏情形假设”，开展暴露浓度和暴露量估算。

## 实用性

充分利用现有数据和资料，基于合理假设的标准暴露场景开展暴露评估。

# 评估程序

化学物质暴露评估程序主要包括方案制定、信息收集、暴露场景构建、环境排放评估、环境暴露评估、健康暴露评估、编制暴露评估报告等步骤，评估程序见图1。

预测环境浓度（大气、地表水、地下水、沉积物、土壤、捕食动物、STP微生物）

日均暴露量

（呼吸、饮水、摄食）

日均总暴露量

**暴露评估报告**

环境归趋与分配参数估计

评估内容

评估范围

评估方法

物质信息

排放参数

环境参数

人体暴露参数

人体暴露参数

工业源

消费源

**方案制定**

**信息收集**

**环境排放评估**

**环境暴露评估**

**健康暴露评估**

排放场景构建

暴露场景构建（环境、人体）

STP

**暴露场景构建**

废物利用处置源

图1 暴露评估程序

# 方案制定

开展环境与健康暴露评估前，应首先制定暴露评估方案，主要包括以下内容。

## 评估内容

暴露评估包括环境暴露评估和健康暴露评估，环境暴露评估主要估算化学物质对水生环境、土壤环境、大气环境以及STP微生物环境的预测暴露浓度（PEC），健康暴露评估主要估算化学物质经由环境对一般人群的日均暴露剂量（ADD）。化学物质暴露评估需要估算的PEC和ADD见表1。

表1 暴露评估内容

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 保护目标 | | 相关环境介质或暴露途径 | PEC/ADD |
| STP | 微生物 | STP微生物环境 | *PEC*stp |
| 大气环境 | 大气 | 大气 | *PEC*air.L |
| 水生环境 | 淡水水生生物 | 地表水 | *PEC*water. L |
| 淡水底栖生物 | 沉积物 | *PEC*sed. L |
| 水生捕食动物 | 鱼 | *PEC*aqu,predator |
| 土壤环境 | 土壤生物 | 土壤 | *PEC*soil. L |
| 陆生捕食动物 | 蚯蚓 | *PEC*ter,predator |
| 一般人群 | | 大气（吸入途径） | *ADD*inh |
| 土壤（摄食途径） | *ADD*oral.soil |
| 鱼（摄食途径） | *ADD*oral.food |
| 地表水或地下水（饮水途径） | *ADD*oral.water |

对于PBTs/vPvBs物质，仅进行环境排放估算，应识别所有潜在排放源，确定最小化排放和暴露的生产使用条件和环境风险控制措施。

## 评估范围

### 空间尺度

环境与健康暴露评估的空间尺度分为局部尺度和区域尺度。

（1）局部尺度

基于“合理的最坏情形假设”，在局部尺度中，假定保护目标位于排放源附近（一般设定为周边100 m到1000 m范围），在评估的空间范围内只有单个排放源。

（2）区域尺度

相对于局部尺度而言，指更大范围的空间区域，可能涉及多个排放源。

### 生命周期阶段

化学物质暴露评估涉及的生命周期阶段一般包括生产、配制、工业使用、消费使用和废物利用处置，应根据具体情况确定纳入评估范围的生命周期阶段。

### 评估对象

化学物质暴露评估一般仅为化学物质本身，对于在使用过程或环境中发生水解、生物降解或化学反应等转化，且转化产物（或“降解产物”或“代谢产物”）稳定存在或具有毒性时，应定性描述降解途径以及潜在的暴露受体，必要时按与母体物质相同的方式评估其环境与健康暴露。

## 评估方法

可使用基于暴露场景的模型预测法和/或实测法，以多重证据的方式开展暴露评估。实测数据应经过质量评估和代表性评估。

### 模型预测法

通过设定环境暴露场景和人体暴露场景模拟实际暴露情况，开展环境排放评估并在此基础上开展环境暴露评估和健康暴露评估，预测拟评估化学物质的PEC或ADD。推荐采用基于通用与保守假设的标准环境暴露场景/健康暴露场景。也可采用更接近实际情况的暴露场景及高层级评估方法并说明理由。

### 实测法

实际监测拟评估化学物质在评估区域各环境介质、环境生物及食物中的浓度。

# 信息收集

## 化学物质信息

化学物质涉及的行业领域、生命周期阶段、用途。

相对分子量、蒸汽压、熔点、水溶解度、正辛醇-水分配系数、吸附系数，及生物降解性和生物富集系数等。

## 排放参数

排放源数量或分布，每种用途的使用量、使用条件、三废产生情况、排放时间、排放介质、排放量和污染控制措施等。

## 环境暴露参数

STP日处理量和工艺，气象（如温度、风速、降雨），水文水质（如流量、悬浮物浓度），沉积物与土壤理化特性（如有机碳含量）和污泥年施用率等。

## 人体暴露参数

暴露人群、暴露途径、人群暴露参数等。

## 暴露监测数据

通过实际监测得到的化学物质排放浓度、在环境介质中的浓度、人体暴露剂量及监测方法、采样地点等信息。

# 暴露场景构建

根据收集的相关信息构建环境和人体暴露场景。首先识别所有环境排放源并构建排放场景，明确化学物质的环境排放去向和受纳环境介质；在环境排放场景基础上结合化学物质特性参数和环境参数等构建环境暴露场景；在环境暴露场景基础上，结合人体暴露参数等构建健康暴露场景。

## 排放场景构建

环境暴露评估通常基于“合理的最坏情形假设”、针对不同类型的排放源分别构建环境排放场景，或采用更接近实际情况的场景并说明理由。

### 排放源识别

首先，根据化学物质涉及的生命周期阶段（包括生产、配制、工业使用、消费使用和废物利用处置阶段）识别所有排放源，包括工业源、消费源、废物利用处置源。

工业源指相对集中排放化学物质的生产、配制、工业使用企业。行业分类参考附录A表A.2。若一种化学物质在多个行业应用（如染料可以用于织物印染、纸张染色、涂料染色、液晶染色等），应识别所有相关行业的工业源。工业源产生的废气、废水直排或经过处理后排入大气和地表水。

消费源指化学物质及相关产品的广泛分散使用导致的具有分散排放特征的排放源，如个人、家庭、个体户等，包含化学物质及相关产品的所有相关用途。

固体废物利用处置源指利用、焚烧、填埋含化学物质的工业固体废物、生活垃圾的企业。

### 工业源排放场景构建

工业源排放场景应明确拟评估化学物质的生产使用量、生产使用工艺和三废产生情况、污染控制措施、排放时间、排放途径和介质、排放频率模式、周边环境等内容。

#### 生产使用量

明确涉及的化学物质年生产量和/或使用量、企业生产使用规模及比例。

#### 生产使用工艺和三废产生情况

说明化学物质的生产使用工艺、方式、条件，含化学物质的废气、废水、固体废物（三废）的产生情况，包括类型、产生环节、产生量、拟评估化学物质的含量等，以及测算依据。

工业源可绘制化学反应方程式、工艺流程图、物料平衡图/表，并说明物料回用、设备封闭性及清洗等影响化学物质三废产生的因素。

化学物质的三废产生量可采用排放系数法、物料衡算法、专家评估法或实测法等估算。其中，环境排放系数可以参考附录A。

#### 污染控制措施

如果有废水、废气和废物污染控制措施，应详细说明并给出对化学物质的去除率。某些污染控制措施在减少向一个环境介质排放的同时可能会增加向其他介质的排放（例如，对废气进行水淋净化处理，化学物质将由废气进入废水）。

#### 排放时间

排放时间指年排放天数。

#### 排放去向

工业源应说明三废的去向，主要考虑向大气和地表水的直接排放以及经废气、废水处理后的排放，以及向其他单位转移废物（包括污泥农用、废弃产品收集和利用处置）的情况。

#### 排放频率

指连续排放和间歇排放。间歇排放指每月少于1次且每次不超过24小时的排放。

#### 周边环境

包括影响化学物质环境归趋和分布的周边环境因素，如温度、风速、受纳水体及流量等。

### 消费源排放场景构建

消费源排放场景应明确化学物质消费情况，排放时间和频率、排放去向、排放时空变异性，STP处理情况等。

#### 消费情况

包括拟评估化学物质用途、用量、含量、使用方式、使用寿命，相关使用用途是否释放出该化学物质等情况。

#### 排放时间和频率

默认为连续排放模式，排放时间为365天。

#### 排放去向

明确化学物质及相关产品消费过程中向大气、水等环境介质排放的情况及相关产品废弃后的处理处置方式，如生活垃圾填埋、焚烧或回收利用。重点考虑化学物质随生活污水直接排放和经STP处理后排入环境的情形。

#### 排放的时空变异性

明确化学物质在时间和空间的变异性，如排放地域、人口密度、时间（季节或时间）等对排放峰值的影响，可使用变异因子来描述。

#### STP处理情况

明确STP的规模和工艺、对拟评估化学物质的去除率，以及STP的废气、废水、污泥的排放去向、产生量及其中拟评估化学物质的含量和周边环境等信息。

### 固体废物利用处置源排放场景构建

固体废物利用处置源排放场景应明确拟评估化学物质或含拟评估化学物质的相关固体废物类型（包括工业固体废物、含拟评估化学物质的废弃产品等）、产生量、利用处置工艺和三废产生情况、污染控制措施、排放时间、排放途径和介质、排放频率模式、周边环境等内容，具体参照工业源排放场景（8.1.2）进行构建。

## 暴露场景构建

### 环境暴露场景

在排放场景的基础上，暴露场景须进一步明确以下信息：

（1）环境暴露途径。环境暴露途径是指化学物质进入环境后迁移转化及接触环境受体的过程。

工业源化学物质通过直接排放或经处理后排放进入大气和地表水；消费源化学物质通过直接排放或STP间接排放进入地表水；化学物质通过水中悬浮物的沉降至沉积物；化学物质通过大气的干湿沉降以及污泥农用进入土壤，通过土壤孔隙水的淋溶进入地下水。捕食动物的暴露途径为捕食土壤中的蚯蚓或地表水中的鱼类。环境暴露途径见图2，适用时可考虑其他更多暴露途径。

（2）环境暴露参数。指STP、地表水、悬浮物、沉积物和土壤等环境介质的环境暴露参数，包括气象、水文水质、沉积物与土壤理化特性等。

地下水

土壤

地表水

STP

沉积物

挥发

污泥农用

稀释

孔隙水淋溶

悬浮物沉积

排放

沉降

排放源

大气

水生捕食动物

陆生捕食动物

稀释

捕食蚯蚓

捕食鱼

局部尺度

区域尺度

背景浓度

图2 环境暴露路径

### 健康暴露场景

在环境暴露场景的基础上，考虑吸入大气、饮用地表水或地下水和摄食（见图3）等通过环境间接暴露于人体的途径（必要时考虑儿童摄入土壤暴露）构建健康暴露场景。摄食途径重点考虑摄食鱼类，适用时可考虑更多摄食途径。

鱼

**地表水**

**地下水**

**土壤**

**空气**

饮用

水

人体

（总暴露）

吸入

饮水

摄食

摄食（仅儿童）

图3 人体暴露途径

# 排放估算

根据构建的排放场景，按照工业源（生产、配制、使用）、消费源和废物利用处置源分别估算环境排放率。仅考虑正常生产或使用条件下产生的环境排放，不包括泄漏、爆炸等事故性排放。

废水排放到环境之前，如果进入园区STP或市政STP处理，还应估算含化学物质的废水经STP处理后的环境排放系数，及在污泥中的浓度。

## 工业源排放估算

工业源通常估算日排放率，主要考虑向环境（水、气）的直接排放，以及经由废水、废气处理措施后的间接排放。对土壤有显著直接排放的，也应考虑。可对排放源排放情况进行实际监测，或通过以下方法进行估算。

每个场景向环境介质（水、大气、土壤）的环境排放率计算方法见公式（1）：

（1）

式中：*E*——局部尺度向环境介质（水体、大气、土壤）的日排放率，kg·d-1；

*Q*chemical——某排放场景涉及的化学物质的年生产量或使用量，kg·y-1；

*F*main——主要排放源的占比，无量纲。通常，默认*F*main=1；如果有多个排放源的，应按照最大的排放源估算。

*F*emission——排放系数，无量纲。排放系数应以排放的化学物质占化学物质年生产量或使用量的比例表示，可参考附录A。

*F*abatement——企业自有污染控制措施对拟评估化学物质的减排效率，无量纲；对于废水经过市政污水处理厂的，还应考虑市政污水处理厂废水减排效率（具体计算过程见9.4）。没有数据时，默认为0。

*T*emission——年排放时间，d·y-1。应以每年最小排放天数计算，可参考表2。

表2 工业源不同生命周期阶段排放时间默认值

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 生命周期阶段 | 年生产量（*Q*chemical）/t·y-1 | 年排放时间（*T*emission）/d·y-1 |
| 生产 | <1 000 | 20 |
| 1 000 - 10 000 | 100 |
| ≥10 000 | 300 |
| 配制 | < 100 | 10 |
| 100 - 2 000 | 100 |
| ≥2 000 | 300 |
| 使用 | < 1 000 | 20 |
| 1 000 - 5 000 | 100 |
| ≥5 000 | 300 |
| 注：参考自“ECB. Technical Guidance Document on Risk Assessment, Part II. 2003” | | |

## 消费源排放估算

在开展消费源排放估算时，重点考虑化学物质随生活污水直接排放和经STP处理后间接排入水、大气和土壤环境的情形，鼓励开展消费过程中化学物质向大气和土壤的直接排放估算。化学物质随生活污水排放情况通常采用年均日排放率表征，推荐采用以下方法估算。对仅处理生活污水的污水处理厂，也可使用实际排放监测数据。

化学物质随生活污水排放时，一部分直接排入地表水、一部分经STP处理后排入地表水。标准场景下，假设50%的废水通过STP处理，另50%直排进入地表水。也可根据排放源所在地的污水处理水平合理设置污水处理率，但须详细说明依据。

废水经STP处理的排放率以及直排进入地表水的排放率计算方法分别见公式（2）和（3）：

（2）

（3）

式中：*E*——局部尺度废水经STP处理部分的地表水年均日排放率（*E*water.L），或废水直接排放部分的地表水年均日排放率（*E*directwater.L），kg·d-1；

*Q*chemical——某排放场景涉及的化学物质的全国年使用量，kg·y-1；

*F*reg——区域使用量占全国的比例，无量纲，默认为0.1；

*F*local——STP服务区域用量占区域用量的比例，无量纲，默认为0.0005；

*F*variability——空间和时间的变异因子，无量纲，默认为4；

*F*emission——排放系数（以纯物质计），无量纲，可参考附录A；

*F*directwater——废水直排地表水比例，无量纲，默认为0.5；

*T*emission——年排放时间，d·y-1，默认为365。

消费源还应考虑废水进入STP处理后向大气和土壤的间接排放，估算方法见9.4章节，消费过程中化学物质向大气和土壤的直接排放率参考公式（3）估算。

## 废物利用处置源排放估算

对环境排放具有显著贡献的废物处理方法，应进行定量的排放量估算。可通过公式（4）估算大气、土壤和地表水环境排放率，也可采用实际监测数据。

（4）

式中：——局部尺度废物利用处置源向大气、土壤或地表水的日排放率，kg·d-1；

*Q*chemical——化学物质生产使用的量，t·y-1；

*f*waste——某排放场景下，进入废物的化学物质的比例，无量纲；

*RF*env——废物利用处置环境排放系数，无量纲；

*T*emission——年排放时间，d·y-1。

## 市政污水处理厂排放估算

废水排放到环境之前，如果进入市政STP处理，应进行STP排放估算。污泥农用时，还应估算污泥中化学物质的浓度。具体见表3。

表3 STP环境排放系数

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 参数名称 | 参数符号 | 单位 | 参数用途 |
| STP地表水排放系数 | *F*stp.water | 无量纲 | 地表水环境暴露评估 |
| STP大气排放系数 | *F*stp.air | 无量纲 | 大气环境暴露评估 |
| STP污泥排放系数 | *F*stp.sludge | 无量纲 | 土壤环境暴露评估 |
| 污泥中化学物质浓度 | *C*sludge | mg·kg-1 | 土壤环境暴露评估 |

应确定STP处理工艺。基于保守情形假设，建议采用C-STP（O）模型开展STP排放评估，估算表3中STP排放系数。C-STP（O）以传统活性污泥法（O型）为基础，将初沉池、曝气池和二沉池涉及的大气、水、悬浮物和污泥划分为9箱，根据化学物质的准一级降解动力学、惠特曼双阻力以及逸度理论，结合平流和扩散流过程，构建各箱质量守恒方程，用于估算化学物质STP环境排放系数。具体计算过程参见附录D。

适用时，可采用更接近实际情况的化学物质特性参数（如生物降解模拟测试数据）、特定STP工艺参数及环境参数等进行评估，也可根据实际情况使用基于生化和深度处理工艺的STP模型，但需详细说明。

# 环境暴露评估

化学物质排放后，在环境中经迁移、转化和分配后暴露于环境。环境暴露评估主要包括：（1）推导关键的环境归趋与分配参数；（2）估算各环境介质的局部PEC，局部PEC为环境排放暴露浓度和环境背景暴露浓度之和，环境背景暴露浓度用区域尺度PEC表征。建议使用化学物质暴露评估软件（CET）（参见附录G）计算。（3）适用时，开展环境暴露浓度监测数据与估算数据对比，确定用于环境风险评估的暴露浓度。

## 环境归趋与分配参数推导

化学物质进入环境（包括STP）后，经迁移、分配和降解等过程最终赋存于环境中。在预测PEC时，需要估算化学物质的环境归趋与分配参数（见表4）。

表4 化学物质归趋与分配需要估算的参数

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 归趋与分配过程 | 参数名称 | 参数符号 | 单位 |
| 气-水分配 | 气-水分配系数 | *K*air-water | 无量纲 |
| 气-气溶胶分配 | 气溶胶颗粒的吸附比例 | *F*assaer | 无量纲 |
| 环境介质（土壤、沉积物、悬浮物和污泥）-水分配 | 土壤-水分配系数 | *K*soil-water | m3·m-3 |
| 沉积物-水分配系数 | *K*sed-water | m3·m-3 |
| 悬浮物-水分配系数 | *K*susp-water | m3·m-3 |
| 生物富集 | 蚯蚓生物富集系数 | *BCF*worm | L.kgwwt -1 |
| 生物降解 | 活性污泥生物降解速率常数 | *k*bio.stp | d-1 |
| 土壤生物降解速率常数 | *k*bio.soil | d-1 |

可使用化学物质的属性信息（见7.1节）推导环境归趋与分配参数。其中，温度对化学物质的水溶解度和蒸气压有显著影响，采用附录C.1方法，校正化学物质的水溶解度和蒸气压。环境归趋与分配参数的推导方法见附录C.2和C.3。

### 分配系数

（1）气-水分配系数。影响物质在水相和气相分配过程（例如，STP曝气池中的汽提，土壤孔隙水和气的分配，空气和雨水的分配），可使用亨利常数估算。

（2）气-气溶胶分配。影响化学物质在空气相和气溶胶颗粒相之间的分配，进而影响向土壤的干湿沉降。可使用蒸气压及气溶胶颗粒表面积等估算气溶胶颗粒的吸附比例。

（3）环境介质（土壤、沉积物、悬浮物和污泥）-水分配。描述化学物质的吸附过程，可使用吸附系数及环境介质性质（如有机碳）等估算。

（4）生物富集系数。影响化学物质在鱼体和捕食动物体内浓度。鱼类生物富集系数可通过实验测定，蚯蚓生物富集系数可根据正辛醇-水分配系数估算。

### 降解速率常数

局部尺度考虑的降解去除过程为包括污水处理厂中的水解和生物降解，以及土壤中的生物降解。通常假定化学物质的降解呈准一级动力学，利用生物降解速率常数模拟化学物质的去除过程。可使用生物降解筛选测试结果保守估算生物降解速率常数。如果筛选测试结果显示不具有快速生物降解或固有生物降解性，可进一步采用污水处理模拟试验或土壤中的生物降解试验结果确定生物降解速率常数。

区域尺度还可考虑化学物质的光解，及在地表水和沉积物中的生物降解等去除过程。

### 特殊化学物质的考虑

大多数环境归趋与分配参数的估算模型针对有机物开发，对于金属类、无机物、可电离物质、颗粒物的评估应用须特别注意。

对于金属类和无机物，应基于转化和分配更多的具体信息。可电离物质评估时应考虑环境pH值对电离程度和归趋的影响。

分配系数的估算仅限于分子态物质。当化学物质以颗粒态（如粉尘）分布于环境时，使用分配系数法估算可能会低估土壤和沉积物的暴露浓度，高估水中的暴露浓度。当粒径很小时则可能易于逸散进入大气。对于颗粒物的分配，应根据具体情况逐例评估。

## 区域尺度环境暴露浓度估算

区域尺度环境暴露浓度代表化学物质的环境背景暴露浓度。区域尺度上，假定化学物质的排放输入是持续的，且化学物质排放进入环境后，在环境相内或相间迁移、转化和分配所涉及的时间较长，涉及各种迁移和转化过程，并最终达到稳态浓度。

区域尺度应根据化学物质的环境排放所在地区确定，或基于合理最坏情形假设，选择人口密集（如长三角区域）、或生产使用集中的区域（如化工园区）开展评估，且评估时须考虑区域内所有排放源，及向各环境介质（大气、地表水和土壤）的总排放率。

区域尺度环境暴露浓度主要通过基于稳态机制的环境多介质模型进行估算，环境多介质模型通常包含大气、地表水、沉积物和土壤等环境相，且假定各环境相混合均匀。

## 局部环境暴露浓度估算

化学物质由排放源排出后，经分配、转化和迁移后进入各环境介质并经食物链进入捕食动物。化学物质环境暴露浓度通常以局部环境暴露浓度表示，估算时需同时考虑化学物质经排放源排放进入环境的浓度（即环境排放暴露浓度），以及评估区域该化学物质原先的背景浓度（即环境背景暴露浓度，用区域尺度PEC表征）。

应开展局部环境浓度估算的环境介质包括：STP微生物环境、大气、地表水、沉积物、土壤和捕食动物。对于可能进入地下水的，应开展地下水暴露评估。

根据环境排放率、环境归趋和分配参数，以及假定的环境暴露途径和暴露参数（见附录B表B.2），应用暴露模型开展局部PEC（见表5）估算（具体估算方法见附录D和附录E）。

表5 需要估算的预测环境浓度

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 环境介质 | 参数名称 | 参数符号 | 单位 | 用途 | |
| 环境风险表征 | 暴露浓度/量估算 |
| STP微生物环境 | STP微生物PEC | *PEC*stp | mg.L-1 | √ |  |
| 大气 | 大气年均局部PEC | *PEC*air.ann.L | mg.L-1 |  | *ADD*inh.L |
| 大气年均总沉降通量 | *DEP*total.ann | mg·m-2·d-1 |  | *PEC*soil.L |
| 地表水 | 地表水局部PEC | *PEC*water.L | mg.L-1 | √ |  |
| 地表水年均局部PEC | *PEC*water.ann.L | mg.L-1 |  | *ADD*oral.water.L |
| 沉积物 | 沉积物局部PEC | *PEC*sed.L | mg·kg-1 | √ |  |
| 土壤 | 土壤30 d平均局部PEC | *PEC*soil.30.L | mg·kg-1 | √ |  |
| 土壤180 d平均局部PEC | *PEC*soil.180.L | mg·kg-1 |  | *PEC*ter.predator；  *ADD*oral.soil.L |
| 地下水 | 地下水局部PEC | *PEC*grw.L | mg.L-1 |  | *ADD*oral.water.L |
| 捕食动物 | 水生捕食动物PEC | *PEC*aqu.predator | mg·kgwet-1 | √ |  |
| 陆生捕食动物PEC | *PEC*ter.predator | mg.kgwet-1 | √ |  |

### STP微生物暴露浓度

主要考虑生化反应池（曝气池），将STP出水总浓度作为曝气池暴露浓度。可采用C-STP（O）模型开展曝气池暴露浓度估算（见附录D），使用STP出水排放系数估算曝气池暴露浓度。如果采用其它STP模型，应详细说明。

计算方法见附录D公式（D‑40）。

### 局部大气暴露浓度预测

大气暴露评估内容包括：

（1）大气年均局部预测环境浓度（*PEC*air.ann.L）估算。*PEC*air.ann.L为距离排放源100 m处（假定100 m处为厂的外边界）的年均大气浓度。对于工业排放源，化学物质输入量取直接大气排放率（*E*air.L）和STP大气排放率（*E*stp.air）的最大值。对于消费源，仅考虑STP大气排放率（*E*stp.air）。不考虑沉降损失。

（2）大气年均总沉降通量（*DEP*total.ann）估算。*DEP*total.ann为距排放源100 m~1 km范围内大气年均干湿总沉降通量。对于工业排放源，化学物质输入量为直接大气排放量（*E*air.L）和STP大气排放量（*E*stp*.*air）之和。对于消费源，仅考虑*E*stp*.*air。需同时考虑化学物质气态部分和气溶胶结合部分的干湿沉降。

假设大气排放源高度为10 m，废气热量为0（不会导致额外的烟羽抬升），排放源面积为0。根据工业排放源的大气排放量（*E*air.L）和STP大气排放量（*E*stp.air），使用高斯模型，并综合空气和气溶胶颗粒的分配及干湿沉降速率估算。

计算方法见附录E的E.1。

### 局部地表水暴露浓度预测

地表水暴露评估的内容包括：

（1）地表水局部预测环境浓度（*PEC*water.L）。对于工业源，根据实际情况，其为直排地表水浓度或STP排放后地表水浓度。对于消费源，*PEC*water.L为直排地表水浓度与STP排放后地表水浓度的和。

（2）地表水年均局部预测环境浓度（*PEC*water.ann.L）。

假设废水排入地表水后快速完全混合，主要考虑稀释和悬浮物的吸附作用。稀释倍数根据STP出水流量或直排出水流量和受纳河流流量计算，标准场景下默认为10。对于特定场所的评估，可以调整稀释倍数，但须考虑河流流量的波动性，尽量选择较小的稀释倍数（如第10百分位）。如果只有河流平均流量，则使用1/3的平均流量计算，但稀释倍数不得超过1000。稀释倍数的计算只适用于河流，不适用湖泊或河口。

如果*PEC*water.L计算值大于化学物质的水溶解度，须分析并说明原因。

计算方法见附录E的E.2。

### 局部沉积物暴露浓度预测

沉积物暴露评估须估算沉积物局部预测环境浓度（*PEC*sed.L）**。***PEC*sed.L用新沉积悬浮物中的化学物质浓度表示，假设化学物质在水和悬浮物之间达到热力学分配平衡，根据地表水悬浮物浓度，从*PEC*water.L推导获得*PEC*sed.L。

由于强吸附性物质可能与悬浮物发生其它结合作用，在水和悬浮物之间可能无法达到分配平衡，即可能不适用于具有结合作用的强吸附性物质。如果化学物质溶解度较小，或以颗粒态排放进入地表水，则可能会低估沉积物中的浓度。评估时应注意这些情形。

计算方法见附录E的E.3。

### 局部土壤暴露浓度预测

土壤暴露评估的内容包括：（1）30 d平均局部预测土壤环境浓度（*PEC*soil.30.L）；（2）180d平均局部预测土壤环境浓度（*PEC*soil.180.L）。

标准场景中，土壤中化学物质来自STP污泥的持续农用，及附近排放废气中化学物质的干湿沉降，不考虑化学物质对土壤的直接排放。假定污泥施用量为7500 kg·hm-2·y-1，每年施用1次，连续施用5年。土壤中化学物质的去除主要考虑挥发、淋溶和生物降解过程。将污泥施用及大气沉降持续5年（第5次施用开始计）后30 d和180 d内，土壤中化学物质的平均浓度分别作为*PEC*soil.30.L和*PEC*soil.180.L。计算方法见附录E的E.4。

如有其他土壤显著暴露途径的，应采用其他方法科学评估，但须详细说明。

### 局部地下水暴露浓度预测

地下水暴露评估即估算地下水局部预测环境浓度（*PEC*grw.L）。假设土壤和孔隙水达到分配平衡，地下水中的物质浓度主要来自土壤孔隙水，因此将土壤孔隙水浓度作为*PEC*grw.L。土壤孔隙水浓度根据化学物质的土壤-水分配系数和*PEC*soil.180.L估算。计算方法见附录E的E.5。也可使用其他高层级方法进一步评估，但须详细说明。

### 捕食动物暴露浓度预测

捕食动物暴露浓度需估算：水生捕食动物暴露浓度（*PEC*aqu.predator）和陆生捕食动物的暴露浓度（*PEC*ter.predator）。捕食动物暴露浓度为食物中的浓度。

假定水生捕食动物的典型食物链为：水→鱼→捕食动物（如鸟类、野鸭等），则*PEC*aqu.predator为鱼体浓度。鱼体浓度根据生物富集系数（*BCF*）计算。

假定陆生捕食动物的典型食物链为：土壤→蚯蚓→捕食动物，*PEC*ter.predator可认为是蚯蚓体内化学物质的总浓度，即蚯蚓组织以及肠道内容物（土壤）浓度之和。蚯蚓组织的浓度根据土壤浓度和蚯蚓生物富集系数（*BCF*worm）计算。

计算公式见附录E的E.6。

# 健康暴露评估

评估人体通过环境的间接暴露，包括吸入、饮水、摄食途径。摄食途径主要考虑摄食鱼类。必要时，可考虑肉类、奶制品、农产品等。当化学物质在公共场所（如公园）使用时，可考虑儿童的土壤摄入。人体暴露量以不同途径的总暴露量计。

假定一般人群生活在排放源附近，基于局部PEC估算不同暴露途径的人体健康外暴露量（需要估算的暴露量参数见表6），估算方法参见附录F。建议使用化学物质暴露评估软件（CET）（参见附录G）计算。

表6 一般人群暴露途径和暴露量参数

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| 暴露途径 | 参数名称 | 参数符号 | 单位 | 所需环境浓度 |
| 吸入 | 吸入途径日均暴露量 | *ADD*inh | mg·kg-1·d-1 | *PEC*air.ann.L |
| 饮水 | 饮水途径日均暴露量 | *ADD*oral.water | mg·kg-1·d-1 | *PEC*water.ann.L；  *PEC*grw.L |
| 摄食 | 摄食途径日均暴露量 | *ADD*oral.food | mg·kg-1·d-1 | *C*fish.L |
| 摄入土壤的日均暴露量 | *ADD*oral.soil | mg·kg-1·d-1 | *PEC*soil.180.L |
| 总暴露量 | | *ADD*T | mg·kg-1·d-1 | */* |

## 健康暴露参数

关键暴露参数包括：呼吸速率（*IR*air）、饮水摄入率（*IR*water）、鱼摄入率（*IR*fish）和土壤摄入率（*IR*soil）等。基于最坏情形，假设人群发生长期暴露，暴露持续时间为70年。一般仅开展普通人群暴露估算，采用成人暴露参数。若有证据表明对敏感人群存在危害效应时，也可使用易受影响的儿童、孕妇、老人及对化学物质敏感的人群进行暴露评估，并使用相应的暴露参数。推荐使用《中国人群暴露参数手册》中的暴露参数，默认评估模式下采用成人的暴露参数见附录B表B.3。

## 暴露剂量估算

### 吸入暴露剂量估算

对于挥发性物质，吸入暴露途径对总暴露量的贡献较为显著。假定人体长期暴露于排放源附近（100 m）的大气中，使用*PEC*air.ann.L估算吸入暴露剂量。

计算方法见附录F的F.1。

### 饮水暴露剂量估算

假定饮用水取自排放源附近的地表水或者地下水。考虑对饮用水中化学物质的净化率，并使用地表水和地下水处理后的最大浓度计算饮水途径暴露剂量。

计算方法见附录F的F.2。

### 摄食（鱼）暴露剂量估算

假定人体通过摄食排放源附近水体中的鱼类发生暴露，使用鱼体浓度估算摄食途径暴露剂量。计算方法见附录F的F.3。

如果考虑其它摄食（肉类、奶制品、农产品）途径，须详细说明估算过程与依据。

### 土壤摄取暴露剂量估算

当化学物质在公共场所（如公园）使用时，可考虑该暴露途径。使用*PEC*soil.L估算土壤摄取暴露剂量。

计算公式见附录F的F.4。

### 总暴露剂量估算

总暴露剂量为各个途径暴露量之和：

 （5）

式中：*ADD*T——不同途径的化学物质日均总暴露剂量，

mg·kg-1·d-1；

*ADD*n——第n种暴露途径的化学物质日均暴露剂量，

mg·kg-1·d-1。

# 暴露评估报告

暴露评估报告主要包括以下几个方面：

1. 描述纳入评估范围的化学物质生命周期阶段；
2. 描述不同生命周期阶段涉及的排放源、排放场景、排放率估算方法和排放率估算结果；
3. 描述不同生命周期阶段各环境暴露场景、环境暴露评估方法/模型/软件/参数，以及各环境暴露场景下各环境介质和捕食动物局部环境暴露浓度；

（4）描述不同生命周期阶段各健康暴露场景、健康暴露评估方法/模型/软件/参数，以及各健康暴露场景下各暴露途径健康暴露剂量和总暴露剂量。

（资料性附录）  
化学物质环境排放系数

化学物质环境排放系数受到多个因素影响，包括：工业源工艺和设施条件类型（Main Category，MC，见表A.1）、化学物质所涉的行业和用途（见表A.2）、化学物质物理化学特性等。

化学物质环境排放系数参考自“ECB. Technical Guidance Document on Risk Assessment, Part II. 2003”。

表A.1 工业源与消费源类别及特征（MC）

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| MC  编号 | MC名称 | MC  亚类 | 生命周期  阶段 | MC亚类描述 |
| MC1 | 密闭系统使用 | MC1a | 生产 | 中间体不分离（不离开反应容器和设备） |
| MC1b | 生产 | 中间体分离（离开反应容器和设备）后在现场储存，或连续生产化学物质（中间体除外） |
| 配制 | 使用专用设备且无清洗操作 |
| MC1c | 生产 | 中间体分离后离开原位储存，或专用设备生产化学物质（中间体除外） |
| 配制 | 使用专用设备且频繁清洗 |
| MC2 | 物品添加使用 | / | 配制 | 添加进入物品等基质 |
| 工业使用 | 工业用途，或中间体加工使用（非专用设备） |
| MC3 | 非广泛分散使用 | / | 生产 | 使用非专用设备 |
| 配制 | 使用非专用设备 |
| 使用 | 非广泛分散性质的工业使用，或中间体加工使用（非专用设备） |
| MC4 | 广泛分散使用 | / | 使用 | 消费使用（无排放控制措施） |

表A.2 不同行业化学物质排放系数总表

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 行业 | A1生产阶段 | A2配制阶段 | A3工业使用 | A4消费使用 | A5废物处置 |
| IC1基础化工 | A1.1 | A2.1 | A3.1 | NA | NA |
| IC2化工合成 | A1.1（非中间体类）  A1.2（中间体类） | A2.1 | A3.2 | NA | NA |
| IC3电子电气 | A1.1 | A2.1 | A3.3 | NA | NA |
| IC4个人/家庭用品 | A1.1（非清洁剂/洗涤剂）  A1.3（清洁/洗涤剂，产量<1000 t·y-1） | A2.1（非清洁剂/洗涤剂）  A2.2（清洁剂/洗涤剂） | NA | A4.1 | NA |
| IC5公共领域 | A1.1（非清洁剂/洗涤剂）  A1.3（清洁/洗涤剂，产量<1000 t·y-1） | A2.1（非清洁剂/洗涤剂）  A2.2（清洁剂/洗涤剂） | A3.4 | NA | NA |
| IC6皮革加工 | A1.1（非着色剂类）  A1.4（着色剂类） | A2.1 | A3.5 | NA | NA |
| IC7金属提取、精炼和加工 | A1.1 | A2.1（非热传导剂、润滑油及添加剂类）  A2.3（热传导剂、润滑油及添加剂类） | A3.6 | NA | NA |
| IC8矿物油和燃料 | A1.1 | A2.1 | A3.7 | A4.2 | NA |
| IC9胶片 | A1.1 | A2.1（显影水基浴液）  A2.4（光化学物质及其他用于固体材料生产的化学物质） | A3.8 | A4.3 | A5.1 |
| IC10聚合物 | A1.1 | A2.1 | A3.9  A3.10 | NA | NC |
| IC11纸浆、造纸和纸板 | A1.1（非着色剂类）  A1.3（着色剂类） | A2.1 | A3.11  A3.12 | NA | A5.2 |
| IC12纺织加工 | A1.1（非着色剂类）  A1.4（着色剂类） | A2.1 | A3.13 | A4.4 | NA |
| IC13涂料、油漆和清漆 | A1.1 | A2.1 | A3.14 | A4.5 | NA |
| IC14土木和机械工程 | A1.1 | A2.1 | A3.15 | A3.16 | NA |
| IC0其它 | A1.1 | A2.1 | A3.15 | - | - |
| 注：NA为不适用，NC为暂未考虑。 | | | | | |

生产阶段环境排放系数

表 A1.1 一般类

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 环境介质 | 生产量（t·y-1） | 蒸气压（Pa） | 排放系数 | | | |
| MCsa | MC=1b | MC=1c | MC=3b |
| 空气 | / | <1 | / | 0 | 0 | 0.00001 |
| 1-10 | / | 0 | 0.00001 | 0.0001 |
| 10-100 | / | 0.00001 | 0.0001 | 0.001 |
| 100-1000 | / | 0.0001 | 0.001 | 0.0 |
| 1000-10000 | / | 0.001 | 0.005 | 0.05 |
| ≥10000 | / | 0.005 | 0.01 | 0.05 |
| 废水 | <1000 | / | 0.02 | / | / | / |
| ≥1000 | / | 0.003 | / | / | / |
| 土壤 | / | / | 0.0001 | / | / | / |
| a MCs指所有MC，以下同。  b没有MC时，采用的默认值。 | | | | | | |

表 A1.2 中间体类

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 环境介质 | 生产工艺 | 蒸气压（Pa） | 生产量（t·y-1） | 排放系数 | | | |
| MCs | MC=1a | MC=1b | MC=1c |
| 空气 | / | <1 | / | / | 0 | 0 | 0 |
| 1-10 | / | / | 0 | 0 | 0.00001 |
| 10-100 | / | / | 0 | 0.00001 | 0.0001 |
| 100-1,000 | / | / | 0.00001 | 0.0001 | 0.001 |
| 1000-10000 | / | / | 0.0001 | 0.001 | 0.01 |
| ≥10000 | / | / | 0.001 | 0.01 | 0.025 |
| 废水 | 湿法 | / | <1000 | 0.02 | / | / | / |
| / | ≥1000 | 0.003 | / | / | / |
| 干法 | / | / | 0 | / | / | / |
| 土壤 | / | / | / | / | 0 | 0.00001 | 0.0001 |

表A1.3 清洁用品和化妆品类（IC 5公共领域；产量<1000t·y-1，A1.1）

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 环境介质 | 排放系数 | |
| 批处理工艺a | 连续工艺b |
| 空气 | 0.000001 | 0.000001 |
| 废水 | 0.003 | 0.001 |
| 固体废物 | 0 | 0 |
| a如：非离子表面活性剂的乙氧化处理、两性的和阳离子型表面活性剂的生产。  b如：阴离子表面活性剂的磺化和硫化工艺。 | | |

表A1.4 着色剂类

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 环境介质 | 水溶解度（mg·L-1） | 排放系数 |
| 空气 | / | 0.0008 |
| 废水 | <2000 | 0.015 |
| 2000-10000 | 0.02 |
| 10000-100000 | 0.03 |
| 100000-500000 | 0.05 |
| ≥500000 | 0.06 |
| 土壤 | / | 0.0001 |

配制阶段环境排放系数

表 A.2.1 一般类

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 环境介质 | 蒸气压（Pa） | 使用量（t·y-1） | 排放系数 | | | |
| MCs | MC=1b | MC=1c | MC=3 a |
| 空气 | <10 | / | / | 0.0005 | 0.001 | 0.0025 |
| 10-100 | / | / | 0.001 | 0.0025 | 0.005 |
| 100-1000 | / | / | 0.0025 | 0.005 | 0.01 |
| ≥1000 | / | / | 0.005 | 0.01 | 0.025 |
| 废水 | / | <1000 | 0.02 | / | / | / |
| / | ≥1000 | 0.003 | / | / | / |
| 土壤 | / | / | 0.0001 | / | / | / |
| a 没有MC时，采用的默认值。 | | | | | | |

表A2.2 清洁剂/洗涤剂

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| 环境介质 | 排放系数 | | | |
| 粉剂 | 粉饼 | 液体 | 其他 |
| 空气 | 0.0002 | 0.0002 | 0.00002 | 0.0002 |
| 废水 | 0.0001 | 0.00001 | 0.0009 | 0.0009 |
| 固体废物 | 0.0073 | 0.0081 | 0.0032 | 0.0081 |

表A2.3 热传导剂、润滑油及添加剂

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 环境介质 | 蒸气压（Pa） | 排放系数 |
| 空气 | <1 | 0.00005 |
| 1-10 | 0.00001 |
| 10-100 | 0.0005 |
| 100-1000 | 0.0025 |
| ≥1000 | 0.025 |
| 废水 | / | 0.002 |
| 土壤 | / | 0.00001 |

表 A2.4 光化学物质及用于固体材料生产的化学物质

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 环境介质 | 蒸气压（Pa） | 排放系数 |
| 空气 | <1 | 0.0001 |
| 1-10 | 0.001 |
| 10-100 | 0.3 |
| 100-1000 | 0.7 |
| ≥1000 | 1 |
| 废水 | 用于控制晶体生成的物质 | 0.99 |
| 其他功能物质 | 0.002 |
| 土壤 | / | 0.00025 |

工业使用阶段环境排放系数

表 A3.1 基础化工行业

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| 水溶解度（mg·L-1） | 蒸气压（Pa） | 排放系数 | | |
| 空气 | 废水 | 土壤 |
| <100 | <100 | 0.65 | 0.25 | 0.0005 |
| 100-1000 | 0.8 | 0.1 | 0.0025 |
| ≥1000 | 0.95 | 0.05 | 0.001 |
| 100-1000 | <100 | 0.4 | 0.5 | 0.005 |
| 100-1000 | 0.55 | 0.35 | 0.002 |
| ≥1000 | 0.65 | 0.25 | 0.001 |
| 1000-10000 | <100 | 0.25 | 0.65 | 0.005 |
| 100-1000 | 0.35 | 0.55 | 0.002 |
| ≥1000 | 0.5 | 0.4 | 0.001 |
| ≥10000 | <100 | 0.05 | 0.85 | 0.005 |
| 100-1000 | 0.1 | 0.8 | 0.002 |
| ≥1000 | 0.25 | 0.65 | 0.001 |

表 A3.2 化工合成行业

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 环境介质 | 蒸气压（Pa） | 工艺 | 使用量  （t·y-1） | 排放系数 | | | |
| MCs | MC = 1b | MC = 1c | MC = 3a |
| 空气 | <1 | / | / | / | 0 | 0 | 0.00001 |
| 1-10 | / | / | / | 0 | 0 | 0.0001 |
| 10-100 | / | / | / | 0 | 0.00001 | 0.001 |
| 100-1000 | / | / | / | 0.00001 | 0.0001 | 0.01 |
| 1000-10000 | / | / | / | 0.0001 | 0.001 | 0.025 |
| ≥10000 | / | / | / | 0.001 | 0.005 | 0.05 |
| 废水 | / | 湿法 | <1000 | 0.02 | / | / | / |
| / | ≥1000 | 0.007 | 0.0005 | / | / |
| / | 干法 | / | 0 | / | / | / |
| 土壤 | / | / | / | 0.0001 | / | / | / |
| a没有MC时，采用的默认值。 | | | | | | | |

表 A3.3 电气电子工业

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 环境介质 | 蒸气压（Pa） | 排放系数 | |
| MC = 2 | MC = 3 a |
| 空气 | <100 | 0.0005 | 0.0005 |
| ≥100 | 0.0005 | 0.001 |
| 废水 |  | 0.0001 | 0.005 |
| 土壤 |  | 0.0001 | 0.01 |
| a没有MC时，采用的默认值。 | | | |

表 A3.4 公共领域

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| 用途 | 用量（t·y-1） | 排放系数 | | |
| 空气 | 废水 | 土壤 |
| 清洁/清洗剂 | ≤ 1000 | 0.0025 | 0.9 | 0.05 |
| > 1000 | 0 | 1 | 0 |
| 非农用生杀剂 | / | 0.1 | 0.05 | 0.8 |
| 其他 | / | 0.05 | 0.45 | 0.45 |

表 A3.5 皮革加工行业

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 环境介质 | 水溶解度（mg·L-1） | 蒸气压（Pa） | 排放系数 | | |
| MCs | MC = 2 | MC = 3 a |
| 空气 | <100 | <100 | 0.001 | / | / |
| <100 | ≥100 | 0.01 | / | / |
| ≥100 | / | 0 | / | / |
| 废水 | <100 | / | / | 0.05 | 0.9 |
| 100-1000 | / | / | 0.15 | 0.99 |
| ≥1000 | / | / | 0.25 | 0.99 |
| 土壤 | / | / | 0.01 | / | / |
| a没有MC时，采用的默认值。 | | | | | |

表 A3.6 金属提取、精炼和加工工业

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 用途 | 环境介质 | 水溶解度（mg·L-1） | lg *HENRY* | 排放系数 | | |
| MCs | MC = 2 | MC = 3a |
| 非热传导剂、非润滑油及添加剂 | 空气 | / | / | / | 0 | 0.25 |
| 废水 | <100 | / | / | 0.05 | 0.5 |
| 100-1000 | / | / | 0.1 | 0.5 |
| ≥1000 | / | / | 0.25 | 0.5 |
| 土壤 | / | / | / | 0 | 0.05 |
| 热传导剂、润滑油及添加剂 | 空气 | / | <2 | 0.0002 | / | / |
| / | ≥2 | 0.002 | / | / |
| 废水 | 纯油性 | / | 0.185 | / | / |
| 水性及其他 | / | 0.316 | / | / |
| 土壤 | / | / | 0.0001 | / | / |
| a 没有MC时，采用的默认值。 | | | | | | |

表 A3.7 矿物油和燃料工业

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 环境介质 | 蒸气压（Pa） | 排放系数 |
| 空气 | <1 | 0.0001 |
| 1-10 | 0.0005 |
| 10-100 | 0.001 |
| 100-1000 | 0.005 |
| ≥1000 | 0.01 |
| 废水 | / | 0.0005 |
| 土壤 | / | 0.001 |

表 A3.8 胶片行业

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| 环境介质 | 用途 | 蒸气压（Pa） | 排放系数 | |
| MC=2 | MC=3 a |
| 空气 | 固体材料（如胶片） | / | 0 | / |
| 其他 | <1 | / | 0.000035 |
| 1-10 | / | 0.00025 |
| 10-100 | / | 0.0075 |
| 100-1000 | / | 0.025 |
| ≥1000 | / | 0.075 |
| 废水 | 固体材料（如胶片） | / | 0 | / |
| 水溶液：染料耦合剂 | / | / | 0.15 |
| 水溶液：其他 | / | / | 0.8 |
| 土壤 | 固体材料（如胶片） | / | 0 | / |
| 其他 | / | / | 0.00025 |
| a 没有MC时，采用的默认值。 | | | | |

表 A3.9 聚合物行业聚合反应过程

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 环境  介质 | 理化参数 | | 排放系数 | | | | | |
| 蒸气压（Pa） | 水溶解度（mg L-1） | 类别I | | 类别II | | 类别III | |
| 湿法 | 干法 | 湿法 | 干法 | 湿法 | 干法 |
| 空气 | <1 | / | 0.00001 | 0.00001 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1-10 | / | 0.0001 | 0.0001 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 10-100 | / | 0.001 | 0.001 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 100-1000 | / | 0.01 | 0.01 | 0.0005 | 0.0005 | 0 | 0 |
| 1000-10000 | / | 0.05 | 0.05 | 0.001 | 0.001 | 0.0005 | 0.0005 |
| ≥10000 | / | 0.05 | 0.05 | 0.01 | 0.01 | 0.001 | 0.001 |
| 废水 | / | <10 | 0.00001 | 0 | 0.005 | 0 | 0.0005 | 0 |
| / | 10-100 | 0.0001 | 0 | 0.01 | 0 | 0.001 | 0 |
| / | 100-1000 | 0.001 | 0 | 0.025 | 0 | 0.0025 | 0 |
| / | ≥1000 | 0.01 | 0 | 0.05 | 0 | 0.005 | 0 |
| 土壤 | <5000 | / | 0 | 0 | 0.0005 | 0.0005 | 0.00025 | 0.00025 |
|  | ≥5000 | / | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 注：聚合工业中聚合物生产分为：A）聚合反应，包括：A.1）湿法（如：乳剂聚合），A.2）干法（如：气相聚合）；B）其他（如：加聚，缩聚）。  所有类型化学物质的用途分类都是：过程调控，按具体功能分为三种：I 单体，II 催化剂，III 引发剂、抑制剂、延迟剂、链转移剂、硫化剂等。 | | | | | | | | |

表 A3.10 聚合物行业聚合物加工

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 环境介质 | 蒸气压（Pa） | 沸点（°C） | 排放系数 | | 物质类型 |
| A | B |
| 空气 | <1 | <300或未知 | 0.001 | 0 | I |
| ≥300 | 0.0005 | 0 |
| 1-100 | <300或未知 | 0.0025 | 0 |
| ≥300 | 0.001 | 0 |
| ≥100 | <300或未知 | 0.01 | 0 |
| ≥300 | 0.005 | 0 |
| <400或未知 | 0.01 | / | II |
| ≥400 | 0.005 | / |
| <100 | / | 0.1 | 0.1 | III |
| 100-1000 | / | 0.25 | 0.25 |
| 1000-10000 | / | 0.5 | 0.5 |
| ≥10000 | / | 0.75 | 0.75 |
| <1 | <300或未知 | 0.01 | 0 | IV |
| ≥300 | 0.005 | 0 |
| 1-100 | <300或未知 | 0.025 | 0 |
| ≥300 | 0.01 | 0 |
| ≥100 | <300或未知 | 0.1 | 0 |
| ≥300 | 0.05 | 0 |
| <100 | / | / | 0.075 | V |
| 100-1000 | / | / | 0.15 |
| 1000-10000 | / | / | 0.25 |
| ≥10000 | / | / | 0.35 |
| 废水 | / | / | 0.0005 | 0.0005 | I |
| / | / | 0.001 | 0 | II |
| / | / | 0 | 0 | III |
| / | / | 0.0005 | 0.0005 | IV |
| / | / | / | 0.00005 | V |
| 土壤 | / | / | 0.0001 | 0.0001 | I |
| / | / | 0.0005 | 0 | II |
| / | / | 0.00001 | 0.00001 | III |
| / | / | 0.001 | 0.001 | IV |
| / | / | / | 0.00001 | V |
| 注：聚合物加工（成型）分为两种：A热塑型塑料加工，B热固性树脂（预聚物）处理，主要考虑以下5种类型：I（A，B）添加剂，包括抗静电剂、阻燃剂、稳定剂及其他，颜料（着色剂），填料；II（A）增塑剂（软化剂）；III（A，B）溶剂；IV（A，B）加工助剂，包括抗裂剂和抗粘合剂、润滑油和添加剂；V（B）固化剂（反应调节剂，如引发剂）、交联剂（反应调节剂：单体）。 | | | | | |

表A3.11 造纸行业印刷及类似过程

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 环境介质 | 用途 | 蒸气压（Pa） | 水溶解度（mg·L-1） | 排放系数 | |
| MC = 2 | MC = 3a |
| 空气 | 默认值 | <100 | / | 0 | 0.01 |
| 100-1000 | / | 0.05 | 0.2 |
| 1000-10000 | / | 0.25 | 0.5 |
| ≥10000 | / | 0.5 | 0.75 |
| 着色剂、复印剂 | / | / | 0 | / |
| 溶剂 | <100 | / | / | 0.05 |
| 100-1000 | / | / | 0.3 |
| 1000-10000 | / | / | 0.65 |
| ≥10000 | / | / | 0.85 |
| 废水 | 默认值 | / | <100 | 0.0001 | 0.01 |
| / | 100-1000 | 0.005 | 0.05 |
| / | ≥1000 | 0.001 | 0.1 |
| 清洁剂及添加剂 | / | / | / | 0.9 |
| 着色剂、复印剂 | / | / | 0.0005 | / |
| 溶剂 | <100 | / | / | 0.0005 |
| 100-1000 |  | / | 0.001 |
| ≥1000 |  | / | 0.005 |
| 土壤 | 所有用途 | <100 | / | 0.0015 | 0.0015 |
| 100-1000 | / | 0.0001 | 0.0001 |
| 1000-10000 | / | 0.00001 | 0.00001 |
| ≥10000 | / | 0 | 0 |
| a没有MC时，采用的默认值。 | | | | | |

表 A3.12 纸浆、纸和纸板业

| 环境介质 | 用途 | | 水溶解度  （mg·L-1） | 蒸气压  （Pa） | 排放系数 | |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| MC=2 | MC=3 a |
| 空气 | 所有用途 | | <100 | <100 | 0 | 0.0001 |
| 100-1000 | 0.00001 | 0.001 |
| ≥1000 | 0.0001 | 0.01 |
| 100-1000 | <100 | 0 | 0.00001 |
| 100-1000 | 0 | 0.0001 |
| ≥1000 | 0.00001 | 0.001 |
| ≥1000 | <100 | 0 | 0 |
| 100-1000 | 0 | 0.0001 |
| ≥1000 | 0 | 0.001 |
| 废水 | 默认值 | | <100 | <100 | 0.85 | 0.85 |
| 100-500 | 0.75 | 0.75 |
| ≥500 | 0.5 | 0.5 |
| 100-1,000 | <100 | 0.875 | 0.875 |
| 100-500 | 0.85 | 0.85 |
| ≥500 | 0.75 | 0.75 |
| 1000-10000 | <100 | 0.9 | 0.9 |
| 100-500 | 0.875 | 0.875 |
| ≥500 | 0.85 | 0.85 |
| ≥10000 | - | 0.95 | 0.95 |
| 着色剂 | 阴离子碱性染料 | / | / | 0.023 | 0.023 |
| 直接染料 | / | / | 0.04 | 0.04 |
| 阳离子直接染料 | / | / | 0.055 | 0.055 |
| 阴离子或阳离子直接染料 | / | / | 0.028 | 0.028 |
| 酸性染料，阳离子型或未知型 | / | / | 0.079 | 0.079 |
| 增白剂 | / | / | 0.064 | 0.064 |
| 填料、浸渍剂 | | / | / | 0.05 | 0.05 |
| 土壤 | 所有相关用途 | | <100 | / | 0.0015 | 0.0015 |
| 100-1000 | / | 0.0001 | 0.0001 |
| 1000-10000 | / | 0.00001 | 0.00001 |
| ≥10000 | / | 0 | 0 |
| a没有MC时，采用的默认值。 | | | | | | |

表 A3.13 纺织加工业

| 环境介质 | 判别参数 | | | 排放系数 | |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 水溶解度（mg·L-1） | | 蒸气压（Pa） | 非着色剂 | 着色剂 |
| 空气 | <100 | | <100 | 0.05 | / |
| 100-1000 | 0.15 | / |
| ≥1,000 | 0.4 | / |
| 100-1,000 | | <100 | 0.025 | / |
| 100-1000 | 0.05 | / |
| ≥1,000 | 0.15 | / |
| 1,000-10,000 | | <100 | 0.01 | / |
| 100-1000 | 0.025 | / |
| ≥1000 | 0.05 | / |
| ≥10,000 | | <100 | 0.005 | / |
| 100-1000 | 0.01 | / |
| ≥1,000 | 0.025 | / |
| 浸染 | | / | / | 0.0007 |
| 轧染 | 热熔胶物质或未知类型 | / | / | 0.05 |
| 其他物质 | / | / | 0.0025 |
| 印花 | / | / | 0.0025 |
| 废水a | <100 | | <100 | 0.85 | / |
| 100-1000 | 0.75 | / |
| ≥1000 | 0.5 | / |
| 100-1000 | | <100 | 0.875 | / |
| 100-1000 | 0.85 | / |
| ≥1000 | 0.75 | / |
| 1000-10000 | | <100 | 0.9 | / |
| 100-1000 | 0.875 | / |
| ≥1000 | 0.85 | / |
| ≥10000 | | / | 0.95 | / |
| 土壤 | / | | / | / | 0.005 |
| <100 | | <100 | 0.05 | / |
| 100-500 | 0.15 | / |
| ≥500 | 0.4 | / |
| ≥100 | | <100 | 0.025 | / |
| 100-500 | 0.05 | / |
| ≥500 | 0.15 | / |
| a 着色剂废水排放系数(EF)=染色工序排放系数(E.1) + 处理、清洗工序排放系数(E.2)  式中：E.1——染色工序废水排放系数，计算方法为E.1= A / (1 + K×B)。其中A为常数，K为平衡常数，B为1/浴比 (浴比默认为10 kg织物/1 L浴液)，见表A3.13纺织加工业（续表）；  E.2——处理、清洗工序废水排放系数，见表A3.13纺织加工业（续表）。 | | | | | |

表 A3.13 纺织加工业（续表）

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 染料类型 | 着色剂印染工艺 | 参数值 | | | |
| K | A | B | E.2 |
| 分散染料 | 轧染 | 115 | 5 | 1 | 0.055 |
| 印花 | 115 | 2 | 0.5 | 0.12 |
| 直接染料 | 浸染 | 73 | 1 | 0.1 a | 0.01 |
| 活性染料– 毛料 | 浸染 | 190 | 1 | 0.1 a | 0.01 |
| 活性染料– 棉线 | 浸染 | 23 | 1 | 0.1 a | 0.01 |
| 活性染料–一般织物 | 浸染 | 57 | 1 | 0.1 a | 0.01 |
| 还原染料 | 轧染 | 190 | 5 | 1 | 0.055 |
| 印花 | 190 | 2 | 0.5 | 0.12 |
| 硫化染料 | 轧染 | 40 | 5 | 1 | 0.055 |
| 印花 | 40 | 2 | 0.5 | 0.12 |
| 酸性染料（1个SO3） | 浸染 | 90 | 1 | 0.1 a | 0.01 |
| 酸性染料（> 1个 SO3） | 浸染 | 190 | 1 | 0.1 a | 0.01 |
| 碱性染料 | 浸染 | 990 | 1 | 0.1 a | 0.01 |
| 偶氮染料 (naphtole) | 轧染 | 30 | 5 | 1 | 0.055 |
| 印花 | 30 | 2 | 0.5 | 0.12 |
| 金属络合物 | 浸染 | 150 | 1 | 0.1 a | 0.01 |
| 颜料 | 轧染 | 5000 | 5 | 1 | 0.055 |
| 印花 | 5000 | 2 | 0.5 | 0.12 |
| 未知的低溶解度物质 | 轧染 | 190 | 5 | 1 | 0.055 |
| 印花 | 190 | 2 | 0.5 | 0.12 |
| 含酸性基团的未知物质 | 浸染 | 90 | 1 | 0.1 a | 0.01 |
| a默认值。 | | | | | |

表 A3.14 涂料、油漆和清漆业

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 环境介质 | 用途 | 蒸气压  （Pa） | 水溶解度  （mg L-1） | 排放系数 | |
| 水基 | 溶剂型 |
| 空气 | 气溶胶喷涂剂 | / | / | / | 1 |
| 着色剂、缓蚀剂、填料 | / | / | 0 | 0 |
| 表面活性剂 | / | / | 0 | / |
| 软化剂、黏度调节剂及其他 | <10 | / | 0 | 0 |
| 10-500 | / | 0 | 0.001 |
| 500-5000 | / | 0.01 | 0.05 |
| ≥5000 | / | 0.05 | 0.15 |
| 溶剂 | / | / | 0.8 | 0.9 |
| 废水 | 气溶胶喷涂剂 | / | / | / | 0 |
| 着色剂、缓蚀剂、填料 | / | / | 0.005 | 0.001 |
| 表面活性剂 | / | <10 | 0.005 | / |
| / | 10-100 | 0.01 | / |
| / | ≥100 | 0.05 | / |
| 软化剂、黏度调节剂、其他类 | / | <10 | 0.005 | 0.001 |
| / | 10-100 | 0.01 | 0.005 |
|  | ≥100 | 0.05 | 0.01 |
| 溶剂 | / | / | 0.1 | 0.02 |
| 土壤 | 气溶胶喷涂剂 | / | / | / | 0 |
| 着色剂、缓蚀剂、填料 | / | / | 0.005 | 0.005 |
| 表面活性剂 | / | / | 0.005 | / |
| 软化剂、黏度调节剂、其他类 | / | / | 0.005 | 0.005 |
| 溶剂 | / | / | 0.001 | 0.001 |

表 A3.15 工程产业：土木和机械

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 环境介质 | 水溶解度（mg·L-1） | 蒸气压（Pa） | 排放系数 | | |
| MC=2 | MC=3a | MC =4 |
| 空气 | <100 | <10 | 0.0001 | 0.001 | 0.01 |
| 10-100 | 0.001 | 0.01 | 0.1 |
| 100-1000 | 0.01 | 0.1 | 0.25 |
| 1000-10000 | 0.1 | 0.5 | 0.7 |
| ≥10000 | 0.5 | 0.75 | 0.9 |
| 100-1000 | <10 | 0.00001 | 0.0001 | 0.001 |
| 10-100 | 0.0001 | 0.001 | 0.05 |
| 100-1000 | 0.001 | 0.05 | 0.1 |
| 1000-10000 | 0.05 | 0.1 | 0.5 |
| ≥10000 | 0.25 | 0.5 | 0.75 |
| ≥1,000 | <10 | 0 | 0.00001 | 0.0001 |
| 10-100 | 0.00001 | 0.0001 | 0.001 |
| 100-1000 | 0.0001 | 0.001 | 0.01 |
| 1000-10000 | 0.001 | 0.01 | 0.1 |
| ≥10000 | 0.01 | 0.1 | 0.5 |
| 废水 | <100 | <10 | 0.01 | 0.1 | 0.5 |
| 10-100 | 0.001 | 0.01 | 0.1 |
| 100-1000 | 0.0001 | 0.001 | 0.01 |
| 1000-10000 | 0.00001 | 0.0001 | 0.001 |
| ≥10000 | 0 | 0.00001 | 0.0001 |
| 100-1000 | <10 | 0.25 | 0.5 | 0.75 |
| 10-100 | 0.05 | 0.1 | 0.5 |
| 100-1000 | 0.001 | 0.01 | 0.1 |
| 1000-10000 | 0.0001 | 0.001 | 0.05 |
| ≥10000 | 0.00001 | 0.0001 | 0.001 |
| ≥1,000 | <10 | 0.5 | 0.75 | 0.9 |
| 10-100 | 0.1 | 0.5 | 0.7 |
| 100-1000 | 0.01 | 0.1 | 0.25 |
| 1000-10000 | 0.001 | 0.01 | 0.1 |
| ≥10000 | 0.0001 | 0.001 | 0.01 |
| 土壤 | <100 | <10 | 0.005 | 0.01 | 0.05 |
| 10-100 | 0.001 | 0.005 | 0.01 |
| 100-1000 | 0.0005 | 0.001 | 0.005 |
| 1000-10000 | 0 | 0.0005 | 0.001 |
| ≥10000 | 0 | 0 | 0.0005 |
| 100-1000 | <10 | 0.001 | 0.005 | 0.01 |
| 10-100 | 0.0005 | 0.001 | 0.005 |
| 100-1000 | 0 | 0.0005 | 0.001 |
| 1000-10000 | 0 | 0 | 0.0005 |
| ≥10000 | 0 | 0 | 0.0001 |
| ≥1,000 | <10 | 0.0005 | 0.001 | 0.005 |
| 10-100 | 0 | 0.0005 | 0.001 |
| 100-1000 | 0 | 0 | 0.0005 |
| 1000-10000 | 0 | 0 | 0.0001 |
| ≥10000 | 0 | 0 | 0 |
| a没有MC时，采用的默认值。 | | | | | |

消费使用阶段环境排放系数

表 A4.1 个人/家庭用品行业

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| 环境介质 | 用途 | 水溶解度（mg·L-1） | 蒸气压（Pa） | 排放系数 |
| 空气 | 胶黏剂、黏合剂等a | / | / | 0 |
| 气溶胶喷涂剂 | / | / | 1 |
| 抗冻剂 | / | / | 0.0005 |
| 润滑剂和添加剂 | / | <5000 | 0 |
| / | ≥5000 | 0.05 |
| 气味剂 | / | <100 | 0.05 |
| / | 100-2500 | 0.2 |
| / | 2500-10000 | 0.5 |
| / | ≥10000 | 0.9 |
| 溶剂及其他 | <10 | <10 | 0.005 |
| 10-100 | 0.015 |
| 100-1000 | 0.15 |
| 1000-10000 | 0.4 |
| ≥10000 | 0.6 |
| 10-100 | <10 | 0.0015 |
| 10-100 | 0.075 |
| 100-1000 | 0.125 |
| 1000-10000 | 0.25 |
| ≥10000 | 0.4 |
| 100-1000 | <10 | 0.0015 |
| 10-100 | 0.025 |
| 100-1000 | 0.1 |
| 1000-10000 | 0.15 |
| ≥10000 | 0.225 |
| ≥1000 | <10 | 0.00075 |
| 10-100 | 0.03 |
| 100-1000 | 0.075 |
| 1000-10000 | 0.125 |
| ≥10000 | 0.175 |
| 地表水 | 抗冻剂、润滑剂和添加剂（汽车用品） | | | 0.0005 |
| a胶黏剂、黏合剂、防静电剂、漂白剂、清洁剂及添加剂、着色剂、络合剂、化妆品、兽药、软化剂、表面活性剂。 | | | | |

表 A4.1 个人/家庭用品行业（续）

| 环境介质 | 用途 | 水溶解度（mg·L-1） | 蒸气压（Pa） | 排放系数 |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| 废水 | 胶黏剂、黏合剂 | <25 | / | 0 |
| ≥25 | / | 0.005 |
| 气溶胶喷涂剂、抗冻剂、润滑剂和添加剂 | / | / | 0 |
| 防静电剂 | / | / | 0.01 |
| 漂白剂（家庭用品） | / | / | 0.95 |
| 漂白剂（化妆品） | / | / | 0.8 |
| 清洁剂及添加剂、化妆品 | / | / | 1 |
| 表面活性剂 | / | / | 0.99 |
| 着色剂（清洁产品） | / | / | 1 |
| 着色剂（化妆品） | / | / | 0.8 |
| 着色剂（其它） | / | / | 0.5 |
| 络合剂 | / | / | 0.8 |
| 气味剂（化妆品） | / | <2500 | 0.8 |
| / | 2500-10000 | 0.5 |
| / | ≥10000 | 0.1 |
| 气味剂（清洁产品等） | / | <100 | 0.9 |
| / | 100-2500 | 0.8 |
| / | 2500-10000 | 0.5 |
| / | ≥10000 | 0.1 |
| 气味剂（其它） | / | <100 | 0.5 |
| / | 100-2500 | 0.3 |
| / | 2500-10000 | 0.2 |
| / | ≥10000 | 0.05 |
| 软化剂 | / | / | 0.9 |
| 溶剂及其他 | / | <10 | 0.1 |
| / | 10-100 | 0.2 |
| / | 100-1000 | 0.4 |
| / | ≥1000 | 0.6 |
| 土壤 | 胶黏剂、黏合剂 | / | / | 0.0001 |
| 气溶胶喷涂剂、气味剂 | / | / | 0 |
| 抗冻剂 | / | / | 0.0005 |
| 防静电剂 | / | / | 0.001 |
| 漂白剂 (日用品) | / | / | 0.01 |
| 漂白剂(化妆品) | / | / | 0.001 |
| 清洁剂及添加剂 | / | / | 0 |
| 软化剂、表面活性剂 | / | / | 0.01 |
| 着色剂 (清洁用品) | / | / | 0.002 |
| 着色剂(化妆品) | / | / | 0.0001 |
| 着色剂(其他) | / | / | 0.01 |
| 络合剂 | / | / | 0.0001 |
| 润滑剂和添加剂 | / | / | 0.002 |
| 溶剂及其他 | / | <10 | 0.2 |
| / | 10-100 | 0.1 |
| / | 100-1000 | 0.05 |
| / | 1000-10000 | 0.005 |
| / | ≥10000 | 0.002 |

表 A4.2 矿物油和燃料工业

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 环境介质 | 蒸气压（Pa） | 排放系数 |
| 空气 | <10 | 0.005 |
| 10-100 | 0.015 |
| 100-1000 | 0.15 |
| 1000-10000 | 0.4 |
| ≥10000 | 0.6 |
| 废水 | / | 0.0005 |
| 地表水 | / | 0.0001 |
| 土壤 | / | 0.0001 |

表 A4.3 胶片行业

|  |  |
| --- | --- |
| 环境介质 | 排放系数 |
| 空气 | 0 |
| 废水 | 0.4 |
| 土壤 | 0 |
| 注：仅适用于水溶液中光化学物质的排放测算。 | |

表 A4.4 纺织加工行业

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 环境介质 | 水溶解度（mg·L-1） | 排放系数 |
| 空气 | / | 0 |
| 废水 | <250 | 0.1 |
| 250-1,000 | 0.15 |
| 1,000-5,000 | 0.2 |
| ≥5,000 | 0.3 |
| 土壤 | / | 0 |
| 注：只适用着色剂。 | | |

表 A4.5 涂料、油漆和清漆业

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 环境介质 | 用途 | 蒸气压（Pa） | 水溶解度（mg/l） | 排放系数 | |
| 水基 | 溶剂型 |
| 空气 | 气溶胶喷涂剂 | / | / | / | 1 |
| 着色剂、缓蚀剂、填料 | / | / | 0 | 0 |
| 表面活性剂 | / | / | 0 | / |
| 软化剂、黏度调节剂、其他类 | <10 | / | 0 | 0 |
| 10-500 | / | 0 | 0.001 |
| 500-5000 | / | 0.01 | 0.05 |
| ≥5000 | / | 0.05 | 0.15 |
| 溶剂 | / | / | 0.8 | 0.95 |
| 废水 | 气溶胶喷涂剂 | / | / | / | 0 |
| 着色剂、缓蚀剂、填料 | / | / | 0.005 | 0.001 |
| 表面活性剂 | / | <10 | 0.005 | / |
| / | 10-100 | 0.01 | / |
| / | ≥100 | 0.05 | / |
| 软化剂、黏度调节剂、其他类 | / | <10 | 0.005 | 0.001 |
| / | 10-100 | 0.01 | 0.005 |
| / | ≥100 | 0.05 | 0.01 |
| 溶剂 | / | / | 0.15 | 0.04 |
| 土壤 | 气溶胶喷涂剂 | / | / | / | 0 |
| 着色剂、缓蚀剂、填料 | / | / | 0.005 | 0.005 |
| 表面活性剂 | / | / | 0.005 | / |
| 软化剂、黏度调节剂、其他类 | / | / | 0.005 | 0.005 |
| 溶剂 | / | / | 0.01 | 0.01 |

废物处置阶段环境排放系数

表 A5.1 胶片行业

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 环境介质 | 蒸气压（Pa） | 排放系数 |
| 空气 | <1 | 0.000005 |
| 1-10 | 0.000025 |
| 10-100 | 0.00075 |
| 100-1000 | 0.0025 |
| ≥1000 | 0.01 |
| 废水 | / | 0.2 |
| 土壤 | / | 0 |
| 注：仅适用于水溶液中光化学物质的排放测算。 | | |

表 A5.2 造纸业

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 环境介质 | 用途 | | 排放系数 |
| 空气 | / | | 0 |
| 废水 | 着色剂 | | 0.1 |
| 复印剂，根据纸张类型 | 图纸 | 0.2 |
| 纸板 | 0.01 |
| 新闻纸 | 0.15 |
| 卫生用纸 | 0.01 |
| 包装纸 | 0.1 |
| 档案纸 | 0.05 |
| 其他，或多种纸型 | 0.2 |
| 土壤 |  | / | 0 |

（资料性附录）  
暴露参数推荐值

表B.1 STP暴露参数

| 参数 | 符号 | 单位 | 数值 |
| --- | --- | --- | --- |
| **一般参数** | | | |
| 污水日处理量 | *EFFLUEN*stp | m3·d-1 | 2000 |
| 风速 | *WINDspeed* | m·s-1 | 2 |
| **进水（RS）** | | | |
| BOD5 | *BOD*RS | g·L-1 | 0.15 |
| 悬浮物密度 | *ρ*RS | kg·L-3 | 1.6 |
| 悬浮物浓度 | *SS*RS | kg·m-3 | 0.2 |
| 悬浮物有机碳含量 | *Foc*RS | kg·kg-1 | 0.18 |
| **初沉池（PS）** | | | |
| 池深 | *h*PS | m | 4 |
| 水力停留时间 | *HRT*PS | h | 2 |
| 污泥密度 | *ρ*PS | kg·L-3 | 1.6 |
| **曝气池（O）** | | | |
| 池深 | *h*O | m | 3 |
| 污泥密度 | *ρ*O | kg·L-3 | 1.6 |
| 悬浮物（污泥混合液）浓度 | *MLSS*O | kg·m-3 | 3 |
| 污泥有机碳质量分数 | *Foc*O | kg·kg-1 | 0.19 |
| 水力停留时间 | *HRT*O | h | 10 |
| **二沉池（SLS）** | | | |
| 池深 | *h*SLS | m | 3 |
| 污泥密度 | *ρ*SLS | kg·L-3 | 1.6 |
| 悬浮物浓度 | *SS*SLS | kg·m-3 | 0.02 |
| 水力停留时间 | *HRT*SLS | h | 6 |
| 污泥有机碳质量分数 | *Foc*SLS | kg·kg-1 | 0.19 |
| 注1：污水日处理量根据全国4436家STP综合确定（“全国投运城镇污水处理设施清单”2014年版本，环境保护部公告 2015年 第35号）；  注2：其他参数来自“周林军, 刘济宁, 石利利, 等. 好氧生化污水处理厂化学品暴露预测模型构建[J]. 环境科学, 2016, 37(1):228-239”。 | | | |

表B.2 局部尺度环境暴露参数

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 参数 | 符号 | 单位 | 数值 |
| **一般** | | | |
| 固相密度 | *ρ*solid | kg·m-3 | 2500 |
| 水相密度 | *ρ*water | kg·m-3 | 1000 |
| 大气密度 | *ρ*air | kg·m-3 | 1.3 |
| 环境温度 | *T*env | ℃ | 10 |
| 降雨量 | *RAINrate* | mm·y-1 | 674 |
| **地表水** | | | |
| 水中悬浮物浓度（干重） | *SUSP*water | mg·L-1 | 15 |
| 河流流量 | *FLOW* | m3·d-1 | 18000 |
| **悬浮物** | | | |
| 悬浮物中固体的体积分数 | *Fsolid*susp | m3·m-3 | 0.1 |
| 悬浮物中水的体积分数 | *Fwater*susp | m3·m-3 | 0.9 |
| 悬浮固体中有机碳质量分数 | *Foc*susp | kg·kg-1 | 0.1 |
| **沉积物** | | | |
| 沉积物中固体的体积分数 | *Fsolid*sed | m3·m-3 | 0.2 |
| 沉积物中水的体积分数 | *Fwater*sed | m3·m-3 | 0.8 |
| 沉积物固体中有机碳质量分数 | *Foc*sed | kg·kg-1 | 0.05 |
| **土壤** | | | |
| 土壤中固体的体积分数 | *Fsolid*soil | m3·m-3 | 0.6 |
| 土壤中水的体积分数 | *Fwater*soil | m3·m-3 | 0.2 |
| 土壤中大气的体积分数 | *Fair*soil | m3·m-3 | 0.2 |
| 土壤固体中有机碳质量分数 | *Foc*soil | kg·kg-1 | 0.02 |
| 表层土壤深度 | *DEPTH*soil | m | 0.2 |
| 污泥（干重）的年施用率 | *APPL*sludge | kg·m-2·y-1 | 0.75 |
| 注1：环境温度、降雨量来自2018年《中国气候公报》全国平均值；  注2：污泥（干重）的年施用率参考自《农用污泥污染物控制标准》（GB 4284-2018）  注2：其他参数参考自“ECHA. Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment. Chapter R.16: Environmental exposure assessment. Helsinki, Finland: ECHA, 2016”。 | | | |

表B.3 人群暴露参数（成人）

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 参数 | 符号 | 单位 | 数值 |
| 呼吸速率 | *IR*air | m3·d-1 | 0.65 |
| 鱼摄入率 | *IR*fish | kg·d-1 | 0.03 |
| 饮水摄入率 | *IR*water | L·d-1 | 1.85 |
| 每日暴露时长 | *ET* | h·d-1 | 24 |
| 暴露频率 | *EF* | d·y-1 | 365 |
| 暴露持续时间 | *ED* | y | 70 |
| 体重 | *BW* | kg | 60.6 |
| 平均暴露时间 | *AT* | d | *ED*×*EF* |
| 注1：主要参考“环境保护部. 中国人群暴露参数手册（成人卷）. 中国环境出版社, 2013” | | | |

（资料性附录）  
环境行为与归趋参数计算

蒸气压和水溶解度温度校正

蒸气压的校正

将蒸汽压（*VP*）从试验温度校正到环境温度：

（C‑1）

式中：*VP*——环境温度下的蒸汽压，Pa；

Δ*vapHm*——蒸发焓，J·mol-1，默认为50000；

*VP*test——试验温度下的蒸汽压，Pa；

*R*——气体常数，8.314 J·K-1·mol-1；

*T*vptest——蒸气压试验温度，℃；

*T*env——环境温度，℃，推荐值见表B.2。

水溶解度的校正

将水溶解度从试验温度校正到环境温度：

（C‑2）

式中：*SOL*——环境温度下的水溶解度，mg·L-1；

Δsol*H*m——溶解焓，J·mol-1，默认为10000；

*SOL*test——试验温度下的水溶解度，mg·L-1；

*R*——气体常数，8.314 Pa-1·m-3·mol-1·K-1；

*T*soltest——水溶解度试验温度，℃；

*T*env——环境温度，℃，推荐值见表B.2。

环境介质密度的计算

环境介质（土壤、沉积物、悬浮物）的密度计算方法见公式（C‑3）。

（C‑3）

式中：*ρ*comp——环境介质comp（土壤、沉积物、悬浮物质）密度（以湿重计），kg·m-3；

*Fsoild*comp*，Fwater*comp和*Fair*comp——分别为环境介质comp（土壤、沉积物、悬浮物）中固体、水和空气的体积分数，m3·m-3，推荐值见表B.2；

*ρ*soild，*ρ*water和*ρ*air——分别为固体、水和空气的密度kg3·m-3，推荐值见表B.2。

环境介质中的分配

气-水分配

（1）亨利常数

亨利常数（HENRY）采用公式（C‑4）计算：



（C‑4）

式中：*HENRY*——亨利常数，Pa·m3·mol-1；

*VP*——蒸汽压，Pa，校正方法见公式（C‑1）；

*MW*——相对分子质量，g·mol-1；

*SOL*——水溶解度，mg·L-1。

（2）气-水分配系数

化学物质气-水分配系数（*K*air-water）采用公式（C‑5）计算：

（C‑5）

式中：*K*air-water——化学物质的气-水分配系数，无量纲；

*HENRY*——亨利常数，Pa·m3·mol-1，计算方法见公式（C‑4）；

*R*——气体常数，8.314 Pa·m3·mol-1·K-1；

*T*env——环境温度，℃，推荐值见附表B.2。

气-气溶胶分配

大气中化学物质吸附于气溶胶颗粒的比例（*Fass*aer）采用公式（C‑6）计算：

（C‑6）

（C‑7）

式中：*Fass*aer——大气中化学物质吸附于气溶胶颗粒的比例，无量纲；

*CON*junge——Junge方程常数；

*SURF*aer——气溶胶颗粒的表面积，m2·m-3；*CON*junge*×SURF*aer=10-4 Pa；

*VPL*——蒸汽压，Pa，对于气体和液体，*VPL*=*VP*，对于固体，使用公式（C‑7）计算；

*VP*——环境温度下的蒸汽压，Pa，计算方法见公式（C‑1）；

*TEMP*melt——熔点，℃，默认为318；

*T*env——环境温度，℃，推荐值见附表B.2。

环境介质（土壤、沉积物、悬浮物和污泥）-水分配

（1）固-水分配系数

化学物质的固-水分配系数（*Kp*comp），采用公式（C‑8）计算：

（C‑8）

式中：*Kp*comp——化学物质在各种环境介质中（土壤、沉积物、悬浮物、污泥）的固-水分配系数，L·kg-1；

*Foc*comp——环境介质（土壤、沉积物、悬浮物，污泥）中有机碳质量分数，kg·kg-1，*Foc*sludge见表B.1，其它见表B.2；

*Koc*——有机碳-水分配系数，L·kg-1。

（2）环境介质（土壤、沉积物、悬浮物）-水分配

化学物质在环境介质（土壤、沉积物、悬浮物）和水间的分配系数，采用公式（C‑9）计算：

（C‑9）

式中：*K*comp-water——环境介质（土壤、沉积物、悬浮物）-水分配系数，m3·m-3；

*Fair*comp，*Fwater*comp和*Fsoil*comp——分别为环境介质（土壤、沉积物、悬浮物）中气、水和土壤的体积分数，m3·m-3，推荐值见表B.2；

*K*air-water——气-水分配系数，无量纲，计算方法见公式（C‑5）；

*Kp*comp——化学物质在土壤、沉积物或悬浮物中的固-水分配系数，L·kg-1，计算方法见公式（C‑8）；

*ρ*solid——固体的密度，kg·m-3，推荐值见表B.2。

蚯蚓生物富集系数

假定蚯蚓体内的水和脂肪与土壤中的孔隙水达到分配平衡，蚯蚓的生物富集系数（*BCF*worm）可根据公式（C‑10）预测：

（C‑10）

式中：*BCF*worm——蚯蚓的生物富集系数（以湿重计），L.kg-1；

*Kow*——化学物质正辛醇-水分配系数，无量纲；

*ρ*worm——蚯蚓密度（以湿重计），kg.L-1，默认为1。

环境介质中的降解

降解速率常数与降解半衰期的换算

当化学物质降解遵循准一级动力学方程时，降解速率常数（*k*）可以根据降解半衰期（*DT*50）计算，方法见公式（C‑11）：

（C‑11）

式中：*k*——化学物质生物降解速率常数，d-1；

*DT*50——化学物质降解半衰期，d。

水解

对于许多化学物质，水解速率依赖于特定环境的pH值和温度，以及土壤的含水率。

水解速率随温度升高而增加。应通过公式（C‑12）将水解速率常数从试验温度校正到环境温度。



（C‑12）

式中：*k*hydr.water——环境温度下化学物质的水解速率常数；h-1；

*k*hydr.water.test——水解试验温度下化学物质的水解速率常数；h-1；

*T*env——环境温度，K，推荐值见表D.2；

*T*test——水解试验温度，K。

pH值也会影响水解速率，可根据不同pH值的水解速率，使用公式（C‑12）分别校正得到环境温度下不同pH的环境水解速率。

在pH=4-9范围内水解速率显著不同，且母体物质或水解产物具有相关毒性时，应通过考虑pH对水解速率的影响，开展最坏情形评估。

活性污泥中的降解

活性污泥中的降解速率常数为水解速率和生物降解速率常数之和：

（C‑13）

式中：*k*deg.stp——化学物质在活性污泥中的降解速率常数，h-1；

*k*bio.stp——化学物质在活性污泥中的好氧生物降解速率常数；h-1，计算方法见表C.1；

*k*hydr.water——化学物质的水解速率常数；h-1，计算方法见公式（C‑12），默认为0。

**表C.1** 化学物质在污水处理厂活性污泥中的好氧生物降解速率常数外推方法

|  |  |
| --- | --- |
| 测试结果 | *k*bio.stp（h-1） |
| 快速生物降解 | 1 |
| 快速生物降解试验28d通过，但未通过10d观察期 | 0.3 |
| 28d快速生物降解率≥20%，或固有降解率≥70% | 0.1 |
| 固有生物降解率≥20% | 0.03 |
| 不可生物降解 | 1×10-4 |
| 注1：外推方法主要参考自“ECHA. Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment. Chapter R.16: Environmental exposure assessment. Helsinki, Finland: 2016”。 | |

土壤中的生物降解

当没有土壤模拟测试数据时，可使用筛选测试数据外推。当前，对于土壤-水分配系数（*Kp*soil）较低的物质，还没有足够的经验数据可以证明土壤*DT*50与*Kp*soil相关，对于具有高*Kp*soil值的物质，有证据表明土壤降解*DT*50与*Kp*soil存在某种相关性，估算方法见表C.2。使用公式（C‑11）将*DT*50转化为土壤生物速率常数（*k*bio.soil）。

表C.2 化学物质在土壤中的生物降解半衰期外推方法

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| 测试结果 | *DT*50（d） | | | |
| *Kp*soil≤ 100 | 100*<Kp*soil≤1 000 | 1 000*<Kp*soil≤10 000 | *Kp*soil>10 000 |
| 快速生物降解 | 30 | 300 | 3000 | 30000 |
| 快速生物降解试验28d通过，但未通过10d观察期 | 90 | 900 | 9000 | 90000 |
| 28d快速生物降解率≥20%，或固有降解率≥70% | 300 | 3000 | 30000 | 300000 |
| 不降解 | 1000000 | | | |
| 注：外推方法参考自“ECHA. Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment. Chapter R.16: Environmental exposure assessment. Helsinki, Finland: 2016”。 | | | | |

（资料性附录）  
基于C-STP（O）模型的化学物质在STP中的归趋和暴露估算

C-STP（O）模型简介

C-STP（O）模型以普通活性污泥法为基础工艺，典型的O型STP工艺见图D.1，主要包括初沉池、曝气池和二沉池。含化学物质的废水首先进入初沉池进行沉淀，一部分化学物质将吸附在初沉污泥中被排出。初沉池上清液进入曝气池，曝气池含有一定浓度的活性污泥并持续曝气保持好氧条件，可好氧生物降解的化学物质将被降解，易挥发的化学物质在曝气过程中进入大气。废水在曝气池停留一段时间后进入二沉池进行沉淀，为了保持曝气池中污泥的浓度，沉淀后的部分活性污泥又回流到曝气池中，其余污泥与初沉池污泥作为剩余污泥排出。剩余的化学物质随二沉池上清液（包含吸附在少量的悬浮污泥中）排入环境水体。

初沉池

曝气池

二沉池

进水

出水

污泥回流

剩余污泥

图D.1 普通活性法工艺流程

C-STP（O）模型根据化学物质的降解一级动力学、惠特曼双阻力挥发以及逸度理论，将大气、水、悬浮颗粒和沉积污泥划分为9箱，构建质量守恒方程，预测化学物质在STP中的挥发、吸附、二级出水的排放系数，以及在出水和污泥中的浓度。模型使用我国的环境条件和污水处理厂标准场景参数（见表B.1）。C-STP（O）模型概念图见图D.2。

1

3

4

5

6

9

7

8

9

初沉池

曝气池

二沉池

悬浮物

沉积污泥

平流

降解

扩散流

大气

2

图D.2 STP（O）化学物质暴露评估概念模型

概念模型按照O型工艺流程，将各池体拆分为为大气、水相、悬浮物相、沉积污泥相。图D.2中单向箭头表示从i箱到j箱的平流过程，包括水、水中悬浮物、大气的流动以及初沉池和二沉池污泥的去除，平流过程不可逆；双向箭头代表相邻介质i和j间的扩散，由介质i和j的非稳态浓度驱动，包括吸附和挥发；假定降解过程主要发生在曝气池。

综上，概念模型由9相、15个平流过程、6个扩散过程和1个降解过程组成。

模型主要计算过程

质量守恒方程

稳态条件下，各箱质量守恒方程见公式（D‑1）。



（D‑1）

式中：*ki*——第i箱中降解一级动力学常数，s-1。仅考虑第5箱的降解，数值为*k*deg.stp/3600，*k*deg.stp计算方法见公式（C‑13）；

*ci*——第i箱中化学物质浓度，g·m-3；

*Vi*——第i箱的体积，m3；

*A*(i,j)——环境介质从i箱到j箱的平流流速，m3·s-1；

*X*(i,j)——环境介质从i箱到j箱的扩散流速，m3·s-1。

根据概念模型的9个箱体，建立9元一次总质量守恒方程，具体见表D.1。如果*A*(i,j)、*X*(i,j)、*c*(0,2)和*c*(0,3)已知，解9元一次方程即可求解各箱中化学物质浓度，进而计算化学物质经污水处理后向大气、地表水、污泥的排放比例及降解比例。

表D.1 总质量守恒方程组

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 输出 | 输入量(未知) | 输入量(已知) |
|  |  | =0 |
|  |  |  |
|  |  |  |
|  |  | =0 |
|  |  | =0 |
|  |  | =0 |
|  |  | =0 |
|  |  | =0 |
|  |  | =0 |
| 注：*c*(0,2)为STP进水中化学物质溶解态浓度，g·m-3；*c*(0,3)为STP进水中化学物质吸附态浓度，g·m-3。 | | |

容积参数

各池体积（*Volume*n）、面积（*Area*n）以及STP总面积（*A*reastp）计算方法：

*Volume*n=*EFFLUENTstp*×*HRT*n/24

（D‑2）

*Area*n=*Volume*n/*Depth*n

（D‑3）

（D‑4）

式中：*Volume*n——n池（初沉池、曝气池、二沉池）体积，m3；

*EFFLUENT*stp——污水日处理量，m3·d-1，推荐值见表B.1；

*HRT*n——n池（初沉池、曝气池、二沉池）水力停留时间，h，推荐值见表B.1；

*Area*n——n池（初沉池、曝气池、二沉池）表面积，m2；

*Depth*n——n池（初沉池、曝气池、二沉池）深度，m，默认初沉池为4 m，曝气池为3 m，二沉池为3 m；

*Area*stp——STP总面积，m2。

各箱体积（*V*i）计算方法：

*V*1=*Area*stp×*h*air

（D‑5）

*V*2=*Volume*PS

（D‑6）

*V*5=*Volume*O

（D‑7）

*V*7=*Volume*SLS

（D‑8）

*V*3=*V*2×1/3×*SS*PS/(*ρ*O×1000)

（D‑9）

*V*6=*V*5×*MLSS*SLS/(*ρ*SLS×1000)

（D‑10）

*V*8=*V*7×SSSLS/(*ρ*SLS×1000)

（D‑11）

*V*4=*Area*PS×0.1

（D‑12）

*V*9=*Area*SLS×0.1

（D‑13）

式中：*V*i——各箱体积，m；

*h*air——STP上方大气高度，m，默认为10；

*SS*PS、*MLSS*O、*SS*SLS*——*分别为初沉池、曝气池和沉池悬浮物浓度，kg·m-3，推荐值见表B.1；

*ρ*O*、ρ*SLS——分别为进水和二沉池中悬浮物密度，kg·L-3，推荐值见表B.1。

平流

1）平流过程包括大气流、水流、悬浮物流和污泥流。假设在初沉池中有2/3的悬浮物沉降下来，其余1/3的悬浮物进入曝气池，假定STP上方大气流入速度和流出速度相同，平流流量A（i,j）计算方法见公式（D‑14）至（D‑21）：

（D‑14）

（D‑15）

（D‑16）

（D‑17）

（D‑18）

（D‑19）

（D‑20）

（D‑21）

式中：*A*(i,j)——环境介质从i箱到j箱的平流流速，m3·s-1；

*Area*stp——STP总面积，m2，计算方法见（D‑4）；

*h*air——STP上方大气高度，m，默认为10；

*WINDspeed*——风速，m·s-1，推荐值见表B.1；

*EFFLUENT*stp——污水日处理量，m3·d-1，推荐值见表B.1；

*SS*RS——原水中悬浮物浓度，mg·L-1，推荐值见表B.1；

*ρ*RS、*ρ*SLS——分别为进水和二沉池中悬浮物密度，kg·L-3，推荐值见表B.1；

*S*sludge——每日产生的剩余污泥量，kg·d-1，计算方法见（D‑22）；

2）每日产生的剩余污泥量（*S*sludge），是初沉池沉降、流入曝气池和曝气池污泥产生量之和减去二级出水中流出污泥量：

（D‑22）

（D‑23）

（D‑24）

式中：*S*sludge——每日产生的剩余污泥量，kg·d-1；

*P*sludge——曝气池每日污泥产生量，kg·d-1；

*A*(i,j)——环境介质从i箱到j箱的平流流速，m3·s-1；

*ρ*PS、*ρ*SLS——分别为初沉池、二沉池悬浮物密度，kg·L-3，推荐值见表B.1；

*EFFLUENT*stp——污水日处理量，m3·d-1，推荐值见表B.1；

*BOD*RS——进水BOD5，g·L-1，推荐值见表B.1；

*F*BOD.PS、*F*BOD.O——分别为初沉池和曝气池的BOD5去除率，无量纲，默认*F*BOD.PS为36%，*F*BOD.O为90%；

*Y*sludge——污泥产率，kg·kg-1；

*k*SLR——污泥负荷，kg·kg-1，默认为0.14。

扩散

扩散过程由两个相邻的环境介质的非平衡浓度决定，STP中扩散过程包括污泥-水的吸附过程，及水向大气的挥发和曝气过程。扩散流量*X*(i,j)的计算方法：

（D‑25）

式中：*D*(i,j)——i箱到j箱的迁移系数，mol·s-1·Pa-1，吸附D值计算方法见公式（D‑26），初沉池和二沉池的挥发D值计算方法见公式（D‑27），曝气池的挥发D值计算方法见公式（D‑28）；

*Z*i——i箱的逸度容量，mol·m-3·Pa-1，计算方法分别见公式（D‑29）、（D‑30）和（D‑31）。

（D‑26）

（D‑27）

（D‑28）

*Z*3=*Z*6=*Z*8=*Z*9=*Kp*n×*ρ*n/*HENRY*

（D‑29）

*Z*2=*Z*5=*Z*7=1/*HENRY*

（D‑30）

*Z*1=1/[*R×*(273*+T*env)]

（D‑31）

式中：*k*abs——污泥吸附速率常数，s-1，曝气池为ln2/360，初沉池和二沉池为ln2/3600；

*V*i——水相和污泥相体积，m3，计算方法见公式（D‑5）至（D‑13）；

*Area*n——对应n池的面积，m2，计算方法见（D‑3）；

*K*air——大气传质系数，m·s-1，默认为2.78×10-3；

*K*water——水传质系数，m·s-1，默认为2.78×10-5；

*k*aerator——曝气池挥发速率常数，为表面挥发速率常数(*k*surf)和曝气挥发速率常数(*k*strip)之和；

*f*area.O——曝气池占所有池体的面积比例，无量纲；

*Kp*n——对应n池（初沉池、曝气池和二沉池）中污泥的固体-水分配系数，计算方法见公式（C‑8）；

*ρ*n——对应n池（初沉池、曝气池和二沉池）中污泥密度，kg·L-3，推荐值见表B.1；

*HENRY*——化学物质亨利常数，Pa·m3·mol-1，计算方法见（C‑4）；

*R*——气体常数，8.314 Pa-1·m-3·mol-1·K-1；

*T*env——环境温度，℃，推荐取值见表B.1。

降解

化学物质在活性污泥中的降解包括生物降解和水解，假定降解过程遵守一级动力学方程，用一级动力降解速率常数计算化学物质的降解过程。如果无法获得STP中化学物质的*k*stp.bio，可依据表C.1用生物降解筛选试验结果外推获得。对于间歇排放模式，将*k*stp.bio设置为0。

化学物质输入量计算

进水中化学物质溶解态浓度*c*(0,2)和吸附态浓度*c*(0,3)计算方法：

*c*(0,2)= 1000×*E*water.L/*EFFLUENT*stp×*f*dis

（D‑32）

*c*(0,3)=*c*(0,2)×*Kp*RS

（D‑33）

*f*dis=1/(1+*Kp*RS×*SS*RS/1000)

（D‑34）

式中：*c*(0,2)、*c*(0,3)——分别为进水中化学物质溶解态和吸附态浓度，g·m-3；

*E*water.L——向STP废水中化学物质日排放率，kg·d-1，计算方法见8.3节；

*EFFLUENT*stp——污水日处理量，m3·d-1，推荐值见表B.1；

*f*dis——进水中溶解态的化学物质比例，无量纲；

*Kp*RS——原水中悬浮物固水分配系数，L·kg-1，计算方法见公式（C‑8）；

*SS*RS——进水中悬浮物浓度，kg·m-3，推荐值见表B.1。

质量守恒方程求解

根据公式求解质量守恒方程，得到各箱体浓度矩阵***C***：

***C***=***G***-1×***N***

（D‑35）

式中：***C***——质量守恒方程中浓度矩阵，g·m-3；

***G***——质量守恒方程中环境介质的流量矩阵，m3·s-1；

***N***——质量守恒方程中常数矩阵，mol·s-3。

排放系数和各介质浓度计算

STP向二级出水排放系数（*F*stp.water）、大气排放系数（*F*stp.air）和污泥的排放系数（*F*stp.sludge）计算方法分别见公式（D‑36）、（D‑37）和（D‑38），污泥中化学物质浓度（*C*sludge）和STP出水中化学物质浓度（*PEC*stp）计算方法分别见公式（D‑39）和（D‑40）：

（D‑36）

（D‑37）

（D‑38）

（D‑39）

（D‑40）

式中：*F*stp.water、*F*stp.air和*F*stp.sludge——分别为STP向水、气和污泥的排放系数，无量纲；

*ci*——第i箱中化学物质浓度，mol·m-3，计算方法见公式（D‑35）；

*A*(i,j)——环境介质从i箱到j箱的平流流量，m3·s-1，计算方法见公式（D‑14）至（D‑21）；

*E*water.L——排入STP的废水中化学物质日排放量，kg·d-1，计算方法见8.3节；

*PEC*stp——STP曝气池暴露浓度（等于出水中化学物质浓度），mg·L-1；

*C*sludge——污泥中化学物质浓度，mg·kg-1；

*P*sludge——污泥产生率，kg·d-1，计算方法见公式（D‑23）；

*EFFLUENT*stp——污水日处理量，m3·d-1，推荐值见表B.1。

（规范性附录）  
局部尺度环境暴露估算模型

大气

（1）局部大气STP间接排放率（*E*stp.air）：

（E‑1）

式中：*E*stp.air——STP向局部大气的排放量，kg·d-1；

*F*stp.air——STP大气排放系数，无量纲，计算方法见公式（D‑37）；

*E*water.L——局部废水排放率，kg·d-1。

（2）大气中年均浓度（*PEC*air.ann.L）：

（E‑2）

式中：*PEC*air.ann.L——大气中局部年均预测环境浓度，mg·m-3；

*E*air.L——局部大气直接排放率，kg·d-1；

*E*stp.air——局部大气STP间接排放率，kg·d-1，计算方法见公式（E‑1）；

*C*std.air——排放量为1 kg·d-1时大气中的浓度，mg·m-3，默认为2.78×10-4；

*T*emission——年排放天数，d·y-1；

*PEC*air.R——区域大气预测环境浓度，mg·m-3。

（3）假定化学物质气态部分和气溶胶结合部分沉积通量都与排放量成正比，土壤的大气总沉降通量（*DEP*total）和年均大气总沉降通量（*DEP*total.ann）计算方法分别见（E‑3）和（E‑4）：

（E‑3）

（E‑4）

式中：*DEP*total——大气总沉降通量，mg·m-2·d-1；

*E*air.L——局部大气直接排放率，kg·d-1；

*E*stp.air——局部大气STP间接排放率，kg·d-1，计算方法见公式（E‑1）；

*Fass*aer——物质与气溶胶结合的比率，无量纲，计算方法见公式（C‑6）；

*DEP*std.aer——排放量1 kg·d-1时气溶胶结合化学物质标准沉降通量，mg·m-2·d-1，默认为0.01；

*DEP*std.gas——气态化学物质沉降通量，mg·m-2·d-1，默认化学物质lg*HENRY*≤-2时为5×10-4，-2<lg*HENRY*≤2时为4×10-4，2<lg*HENRY*时为3×10-4；

*DEP*total.ann——大气年均总沉降通量，mg·m-2·d-1；

*T*emission——排放天数，d·y-1。

地表水

（1）地表水局部预测环境浓度（*PEC*water.L）应根据直排和STP间接排放的实际排放情况，按照公式（E‑5）计算：

（E‑5）

（E‑6）

（E‑7）

（E‑8）

式中：*PEC*water.L——地表水局部预测环境浓度，mg·L-1；

*C*water.L——STP排放的地表水浓度，mg·L-1，计算方法见公式（E‑6）；

*C*directwater.L——直接排放的地表水浓度，mg·L-1，计算方法见公式（E‑7）；

*PEC*water.R——区域预测环境浓度，mg·L-1；

*PEC*stp——STP出水浓度，mg·L-1，计算方法见公式（D‑40）；

*Kp*susp——悬浮物的固-水分配系数，L·kg-1，计算方法见公式（C‑8）；

*SUSP*water——河流中悬浮物的浓度，mg·L-1，推荐值见表B.2；

*DILUTION*——稀释倍数，无量纲，计算方法公式（E‑8）；

*E*directwater.L——局部直排地表水的排放率，kg·d-1，计算方法见公式3；

*EFFLUENT*stp——污水处理厂出水量，m3·d-1，推荐值见表B.1；

*FLOW*——受纳河流流量，m3·d-1，推荐值见表B.2。

（2）地表水年均局部预测环境浓度（PECwater.ann.L）：

（E‑9）

式中：*PEC*water.ann.L——地表水年均局部预测环境浓度，mg·L-1；

*PEC*water.L——地表水局部预测环境浓度，mg·L-1，计算方法见公式（E‑5）；

*T*emission——排放时间，d·y-1。

沉积物

沉积物中化学物质局部预测环境浓度（*PEC*sed.L）计算方法见公式（E‑10）：

（E‑10）

（E‑11）

式中：*PEC*sed.L——沉积物中化学物质局部预测环境浓度，mg·kg-1；

*K*susp-water——水中悬浮物-水分配系数，m3·m-3，计算方法见公式（C‑9）；

*PEC*water.L——地表水化学物质局部预测环境浓度，mg·L-1，计算方法见公式（E‑5）；

*CONV*sed——沉积物湿重-干重转化系数，kgdwt.kgwwt-1，计算方法见公式（E‑11）；

*ρ*susp——水中悬浮物密度（以湿重计），kg·m-3，计算方法见公式（C‑3）；

*F*soild——土壤中固体的体积分数，m3·m-3，推荐值见表B.2；

*ρ*sed——沉积物密度，kg·m-3，计算方法见公式（C‑3）；

*ρ*soild——固体密度，kg·m-3，推荐值见表B.2。

土壤

土壤中化学物质大气日沉降通量

土壤中化学物质大气日沉降通量（*D*air）：

（E‑12）

式中：*D*air——土壤中化学物质大气日沉降通量，mg·kg-1·d-1；

*DEP*total.ann——大气中化学物质年均沉降通量，mg·m-2·d-1，计算方法见公式（E‑4）；

*DEPTH*soil——土壤混合层深度，m，推荐值见表B.2；

*ρ*soil——土壤密度，kg·m-3，计算方法见公式（C‑3）。

土壤中化学物质的去除

（1）土壤中化学物质总去除一级反应速率常数（*k*soil）：

（E‑13）

式中：*k*soil——土壤中化学物质去除的总一级反应速率常数，d-1；

*k*volat——土壤中化学物质挥发的准一级反应速率常数，d-1，计算方法见公式（E‑14）；

*k*leach——表层土壤化学物质淋溶的准一级反应速率常数，d-1，计算方法见公式（E‑17）；

*k*bio.soil——土壤中化学物质生物降解的准一级反应速率常数，d-1，计算方法见表C.2。

（2）土壤中化学物质挥发的准一级反应速率常数（*k*volat）：

（E‑14）

（E‑15）

（E‑16）

式中：*k*volat——土壤中化学物质的准一级挥发速率常数，d-1；

*Corr*volat.s——土壤挥发速率常数深度校正因子，无量纲；

*K*soil-water——土壤-水分配系数，m3·m-3，计算方法见公式（C‑9）；

*DEPTH*soil——土壤的混合层深度，m，推荐值见表B.2；

*kasl*air——大气-土壤界面气相传质系数，90.5 m·d-1；

*kasl*soil——大气-土壤界面土壤传质系数，m·d-1；

*K*air-water——气-水分配系数，m3·m-3，计算方法见公式（C‑5）；

*k*bio.soil——土壤中化学物质生物降解的准一级反应速率常数，d-1，计算方法见表C.2。

（3）顶层土壤化学物质淋溶的准一级反应速率常数（*k*leach）：

（E‑17）

式中：*k*leach——土壤中化学物质淋溶的准一级反应速率常数，d-1；

*Finf*soil——渗透进入土壤的雨水比例，无量纲，默认为0.25；

*RAINrate*——降水速率，mm·y-1，推荐值见表B.2；

*K*soil-water——土壤-水分配系数，m3·m-3，计算方法见公式（C‑9）；

*DEPTH*soil——土壤的混合深度，m，推荐值见表B.2。

土壤中化学物质浓度的计算

（1）大气沉降持续5年后0时刻土壤中化学物质的浓度（*C*dep.soil10(0)）：

（E‑18）

式中：*C*dep.soil5(0) ——大气沉降持续5年后0时刻，土壤中化学物质的浓度，mg·kg-1；

*D*air——每千克土壤中化学物质大气日沉降通量，mg·kg-1·d-1，计算方法见公式（E‑12）；

*k*soil——土壤中化学物质去除的总一级反应速率常数，d-1，计算方法见公式（E‑13）。

（2）污泥施用1年后0时刻，土壤中化学物质的浓度（*C*sludge.soil1(0)）：

（E‑19）

式中：*C*sludge.soil1(0) ——污泥施用1年后0时刻，土壤中化学物质的浓度，mg·kg-1；

*C*sludge——污泥中化学物质浓度，mg·kg-1，计算方法见公式（D‑39），或者采用实测数据；

*APPL*sludge——污泥的年施用率，kg·m-2·y-1，推荐值见表B.2；

*DEPTH*soil——土壤的混合层深度，m，推荐值见表B.2；

*ρ*soil——土壤密度（以湿重计），kg·m-3，计算方法见公式（C‑3）。

（3）污泥施用持续5年后0时刻，土壤中化学物质的浓度（Csludge.soil10(0)）：

（E‑20）

（E‑21）

式中：*C*sludge.soil5(0)——污泥施用持续5年后0时刻，土壤中化学物质的浓度，mg·kg-1；

*C*sludge.soil1(0) ——污泥施用1年后0时刻，土壤中化学物质的浓度，mg·kg-1，计算方法见公式（B-21）；

*Facc*——1年年末化学物质在土壤中累积的比例，无量纲，计算方法见公式（B-22）：

*k*soil——土壤中化学物质去除的总一级反应速率常数，d-1，计算方法见公式（E‑13）。

（4）污泥施用及大气持续沉降5年后0时刻，土壤中化学物质的浓度（Csoil5(0)）：

（E‑22）

式中：*C*soil5(0)——污泥施用及大气沉降持续5年后0时刻，土壤中化学物质浓度，mg·kg-1；

*C*dep.soil5(0)——大气沉降持续5年后0时刻，土壤中化学物质的浓度，mg·kg-1；计算方法见公式（E‑18）；

*C*sludge.soil5(0) ——污泥施用持续5年后0时刻，土壤中化学物质的浓度，mg·kg-1，计算方法见公式（E‑20）。

（5）污泥施用及大气沉降持续5年后，一段时间（T）内，土壤中化学物质的平均环境浓度（*C*soil.L）：

（E‑23）

式中：*C*soil.L(T)——局部尺度，污泥施用及大气沉降持续5年后，一段时间（T）内土壤中化学物质平均环境浓度，mg·kg-1；

*D*air——土壤的大气日沉降通量，mg·kg-1·d-1，计算方法见公式（E‑12）；

*T*——时间，d；

*k*soil——土壤中化学物质消除的总一级反应速率常数，d-1，计算方法见公式（E‑13）；

*C*soil5(0) ——污泥持续施用5年后土壤中化学物质的初始浓度，mg·kg-1，计算方法见（E‑22）。

（6）土壤30 d局部预测环境浓度（*PEC*soil.30.L）为污泥施用及大气沉降持续5年后，30d内土壤中化学物质的平均环境浓度，计算方法见公式（E‑24）：

（E‑24）

（E‑25）

式中：*PEC*soil.30.L——土壤中化学物质30d局部预测环境浓度，mg·kg-1；

*C*soil.L(30)——污泥施用及大气沉降持续5年后，30 d内土壤中化学物质平均环境浓度，mg·kg-1，计算方法见公式（E‑23）；

*CONV*soil——土壤湿重-干重转化系数，kgdwt.kgwwt-1，计算方法见公式（E‑25）：

*ρ*soil——土壤密度，kg.m-3，计算方法见（C‑3）；

*F*soild——土壤中固体的体积分数，m3.m-3，推荐值见表B.2；

*ρ*soild——固体密度，kgdwt.m-3，推荐值见表B.2。

（7）土壤180 d局部预测环境浓度（*PEC*soil.180.L）为污泥施用及大气沉降持续5年后，180 d内土壤中化学物质的平均浓度：

（E‑26）

式中：*PEC*soil.180.L——土壤中化学物质180d局部预测环境浓度（以湿重计），mg·kg-1；

*C*soil.L(180)——污泥施用及大气沉降持续5年后，180 d内土壤中化学物质平均环境浓度，mg·kg-1，计算方法见公式（E‑23）；

*PEC*soil.R——土壤中化学物质区域预测环境浓度，mg·kg-1。

（8）土壤孔隙水局部预测环境浓度（*PEC*soil.porew.L）：

（E‑27）

式中：*PEC*soil.porew.L——土壤孔隙水局部预测环境浓度，mg·L-1；

*PEC*soil.180.L——土壤中化学物质180 d局部预测环境浓度（以湿重计），mg·kg-1，计算方法见公式（E‑26）；

*ρ*soil——土壤密度（以湿重计），kg.m-3，计算方法见公式（C‑3）；

*K*soil-water——土壤/水分配系数，m3·m-3，计算方法见公式（C‑9）。

地下水

地下水中化学物质局部预测环境浓度（*PEC*grw.L）：

（E‑28）

式中**：***PEC*grw.L——地下水中化学物质局部预测环境浓度，mg·L-1；

*PEC*soil.porew.L——土壤孔隙水局部预测环境浓度，mg·L-1，计算方法见公式（E‑27）。

捕食动物

不同捕食动物的觅食区域会有所不同，应该考虑捕食动物的觅食区域。对于第一营养级的捕食动物，假定50%的食物来自局部地区（用年均局部PEC计算），另50%的食物来自区域尺度（用区域PEC计算）。

水生捕食动物

水生捕食动物浓度（*PEC*aqu.predator）：

*PEC*aqu.predator*=*0.5×(*PEC*water.ann.L+*PEC*water.R)*×BCF*fish

（E‑29）

式中：*PEC*aqu.predator——水生捕食动物浓度（以湿重计），mg·kg-1；

*PEC*water.ann.L——地表水年均局部预测环境浓度，mg·L-1，计算方法见公式（E‑9）；

*PEC*water.R——地表水区域预测环境浓度，mg·L-1；

*BCF*fish——鱼类生物富集系数（以湿重计），L·kg-1。

陆生捕食动物

陆生捕食动物暴露浓度（*PEC*ter,predator）：

（E‑30）

式中：*PEC*ter.predator——陆生捕食动物暴露浓度（以湿重计），mg.kg-1；

*BCF*worm——蚯蚓的生物富集系数（以湿重计），L.kg-1；

*PEC*porewater.L——孔隙水局部预测环境浓度，mg·L-1，计算方法见公式（E‑27）；

*PEC*porewater.R——孔隙水中化学物质区域预测环境浓度，mg·L-1；

*PEC*soil.180.L——土壤中化学物质的180 d局部预测环境浓度，mg·kg-1，计算方法见公式（E‑26）；

*PEC*soil.R——土壤中化学物质区域预测环境浓度，mg·kg-1；

*F*gut.worm——蚯蚓肠道干重占蚯蚓湿重的比例，kgdwt.kgwwt-1，默认为0.1；

*CONV*soil——土壤湿重-干重转化系数，kgdwt.kgwwt-1，计算方法见公式（E‑25）。

（规范性附录）  
局部尺度人体健康暴露估算模型

吸入途径日均暴露量

（F‑1）

式中：*ADD*inh—局部尺度吸入途径化学物质日均暴露量*，*mg·kg-1·d-1；

*PEC*air.L—局部尺度大气化学物质预测环境浓度，mg·m-3。使用*PEC*air.ann.L，计算方法见公式（E‑2）；

*IR*air—呼吸速率，m3·h-1，推荐值见表B.3。

*ET*—每日暴露时长，h·d-1，推荐值见表B.3；

*EF*—暴露频率，d·y-1，推荐值见表B.3；

*ED*—暴露时间，y，推荐值见表B.3；

*BW*—体重，kg，推荐值见表B.3；

*AT*—总暴露天数，d，推荐值见表B.3。

饮用地表水/地下水的日均暴露量

（F‑2）

（F‑3）

式中：*ADD*oral.water——局部尺度饮水途径化学物质日均暴露量，mg·kg-1·d-1；

*PEC*drwl.L——局部尺度饮用水中化学物质浓度，mg/L，取地表水年均局部预测环境浓度（净化后）和地下水中化学物质局部预测环境浓度最大值。计算方法见公式（F‑3）；

*IR*water——经口饮水摄入率，L·d-1，推荐值见表B.3。

*PEC*water.ann.L——地表水年均局部预测环境浓度，mg·L-1；计算方法见公式（E‑9）；

*F*pur——饮用水净化后剩余因子，无量纲，默认为1。可采用具体的净化率数据，但须详细说明。

*PEC*grw.L——地下水中化学物质局部预测环境浓度，mg·L-1，计算方法见公式（E‑28）；

*EF*、*ED*、*BW*和*AT*含义同公式（F‑1）。

摄食途径的日均暴露量

（F‑4）

（‑5）

式中：*ADD*oral.food —局部尺度经口摄食途径化学物质日均暴露量，mg·kg-1·d-1；

*C*fish.L—局部尺度鱼体中化学物质浓度，mg·kg-1，计算方法见公式（E‑5）；

*IR*fish—鱼类摄入率，kg·d-1，推荐值见表B.3；

*EF*、*ED*、*BW*和*AT*含义同公式（F‑1）；

*PEC*water.L——地表水预测环境浓度，mg·L-1。使用*PEC*water.ann.L，计算方法见公式（E‑9）；

*BCF*fish——鱼类生物富集系数，L·kgwet-1；

*EF*、*ED*、*BW*和*AT*含义同公式（F‑1）。

经口摄入土壤的日均暴露量

（F‑6）

式中：*ADD*oral.soil——局部尺度经口摄入土壤中化学物质的日均暴露量，mg·kg-1·d-1；

*PEC*soil.L———局部尺度土壤中化学物质浓度，mg/kg，使用*PEC*soil.180.L，计算方法见公式（E‑26）；

*IR*soil——土壤/尘摄入率，mg·d-1；

*EF*、*ED*、*BW*和*AT*含义同公式（F‑1）。

（资料性附录）  
暴露估算工具（CET）

建议使用CET软件估算化学物质PEC以及ADD。

CET软件采用了本规范规定的估算方法及推荐的暴露参数，软件中包括归趋与分配参数计算、C-STP（O）模型、局部尺度环境与健康暴露估算模型（CET-local）和区域尺度环境暴露估算模型（CET-regional）。由于环境排放率的计算较为灵活，未包含环境排放率模块。

CET主要输入参数为化学物质基础信息，所有排放场景的环境排放率。

CET模型获取来源：<http://www.ctalab.org.cn/>