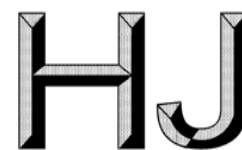


附件二：



中华人民共和国国家环境保护标准

HJ □□□-201□

化学物质风险评估导则

The Guidelines for Risk Assessment of Chemicals

（征求意见稿）

201□-□□-□□发布

201□-□□-□□实施

环 境 保 护 部 发 布

目 次

前 言.....	II
1 适用范围.....	3
2 规范性引用文件.....	3
3 术语和定义.....	3
4 评估程序.....	4
5 定性环境风险评估.....	5
6 定量环境风险评估.....	7
7 定性健康风险评估.....	16
附录 A（资料性附录） 持久性、生物累积性、毒性化学物质风险评估方法	21
附录 B（资料性附录） 化学物质风险评估模型公式参数计算方法	28
附录 C（资料性附录） 定性不确定性分析.....	35

前 言

为贯彻《中华人民共和国环境保护法》，保护环境，保障人体健康，规范化学物质风险评估工作，制定本标准。

本标准规定了化学物质风险评估的原则、内容、程序、方法和技术要求。其中新化学物质的危害性鉴别按照 HJ 154-201□的规定执行。

本标准为首次发布。

本标准由环境保护部科技标准司组织制订。

本标准主要起草单位：中国环境科学研究院。

本标准由环境保护部 201□年□□月□□日批准。

本标准自 201□年□□月□□日起实施。

本标准由环境保护部解释。

化学物质风险评估导则

1 适用范围

本标准规定了化学物质环境风险评估、健康风险评估的技术方法和程序。

本标准适用于新化学物质申报中的专家评审和申报人完成风险评估报告,以及现有化学物质的风险评估。

2 规范性引用文件

本标准引用下列文件中的条款。凡是不注明日期的引用文件,其有效版本适用于本标准。

GB 20592	化学品分类、警示标签和警示性说明安全规范	急性毒性
GB 20593	化学品分类、警示标签和警示性说明安全规范	皮肤腐蚀/刺激
GB 20594	化学品分类、警示标签和警示性说明安全规范	严重眼睛损伤/眼睛刺激性
GB 20595	化学品分类、警示标签和警示性说明安全规范	呼吸或皮肤过敏
GB 20596	化学品分类、警示标签和警示性说明安全规范	生殖细胞突变性
GB 20597	化学品分类、警示标签和警示性说明安全规范	致癌性
GB 20598	化学品分类、警示标签和警示性说明安全规范	生殖毒性
GB 20599	化学品分类、警示标签和警示性说明安全规范	特异性靶器官系统毒性 一次接触
GB 20601	化学品分类、警示标签和警示性说明安全规范	特异性靶器官系统毒性 反复接触
GB 20602	化学品分类、警示标签和警示性说明安全规范	对水环境的危害
GB/T24782	持久性、生物累积性和毒性物质及高持久性和高生物累积性物质的判别方法	
HJ/T153	化学品测试导则	
HJ 154	新化学物质危害鉴别导则	
HJ/T155	化学品测试合格实验室导则	
	《新化学物质环境管理办法》(2010年,环境保护部第7号令)	

3 术语和定义

下列术语和定义适用于本标准。

3.1 化学物质 chemical substances

指任何有特定分子标志的有机物质或无机物质,包括:整体或部分地由化学反应的结果产生的物质或者天然存在物质的任何化合物;任何元素或非化合的原子团。化学物质在环境管理中,通过《中国现有化学物质名录》区分为现有化学物质和新化学物质。

3.2 新化学物质 new chemical substances

未列入《中国现有化学物质名录》的化学物质。

3.3 现有化学物质 existing chemicals

列入《中国现有化学物质名录》的化学物质。

3.4 风险 risk

在特定环境下,生物体、系统或(亚)种群暴露于某种化学物质所产生的不利效应的可能性。

3.5 风险评估 risk assessment

指特定化学物质暴露条件下,目标生物、系统或(亚)种群面临风险及不确定性的估计或计算过程,在此过程中着重考虑化学物质和特定目标生物系统的内在特性。

3.6 危害 hazard

某化学物质所具有的,在生物体、系统或(亚)种群暴露后引起不利效应的固有属性。

3.7 效应 effect

化学物质暴露引起的生物体、系统或(亚)种群状态或动力学的变化。

3.8 危害性评估 hazard assessment

评估某生物体、系统或（亚）种群暴露于某化学物质时的潜在危害性的过程，包括危害性鉴别和危害表征两项内容。

3.9 危害性鉴别 hazard identification

识别一种化学物质因其固有能力而造成一个生物、系统或（亚）种群不利效应的类型和属性。

3.10 危害性表征 hazard characterization

定性或定量的描述一种化学物质可引起潜在有害效应的固有属性。包括剂量（浓度）-反应（效应）关系评估及伴随的不确定性。

3.11 浓度-效应评估 concentration-effect assessment

评估某生物、系统或（亚）种群在一定时间内以某种特定方式暴露于某种化学物质后，产生的效应与暴露量（以浓度形式表示）之间的关系。

3.12 评估系数 assessment factor

从实验测定的（剂量（浓度）-反应（效应））关系外推出估计不会发生不利效应的化学物质暴露浓度的校正系数。

3.13 预测无效应浓度 (PNEC) predicted no effect concentration

在现有认知下，化学物质不会对生物产生不利效应的最大暴露剂量或浓度。

3.14 暴露 exposure

在确定期间内，某化学物质以特定频率到达一个靶生物、系统或（亚）种群的浓度或总量。

3.15 暴露评估 exposure assessment

一个生物体、系统或（亚）种群对于一种化学物质及其衍生物暴露的评估。

3.16 暴露场景 exposure scenario

用来帮助评估和定量一定情境下化学物质暴露的一组条件假设，包括化学物质的来源、暴露途径、数量或者浓度以及暴露的生物、系统或（亚）种群（数目、特征、生境）。

3.17 风险控制措施 risk management measures

为减少化学物质的释放和对化学物质的暴露，降低化学物质对人类健康或环境的风险，而采取的控制策略中的具体措施。能保证风险得到有效控制的风险控制措施为适当风险控制措施。

3.18 预测环境浓度 (PEC) predicted environmental concentration

根据已有关于某化学物质特性、功能、排放方式及使用量的信息而预测出的该化学物质的环境浓度。

3.19 风险表征 risk characterization

在给定的暴露条件下，定性或必要时定量判定某种化学物质对于一种生物体、系统或（亚）种群造成已知或潜在有害效应的可能性，及其不确定性。

4 评估程序

4.1 评估流程

化学物质风险评估工作分为四个技术步骤：危害性鉴别、危害性表征、暴露评估、风险表征。其中危害性鉴别、危害性表征同属危害性评估范畴。

化学物质风险评估技术流程见图 4.1。

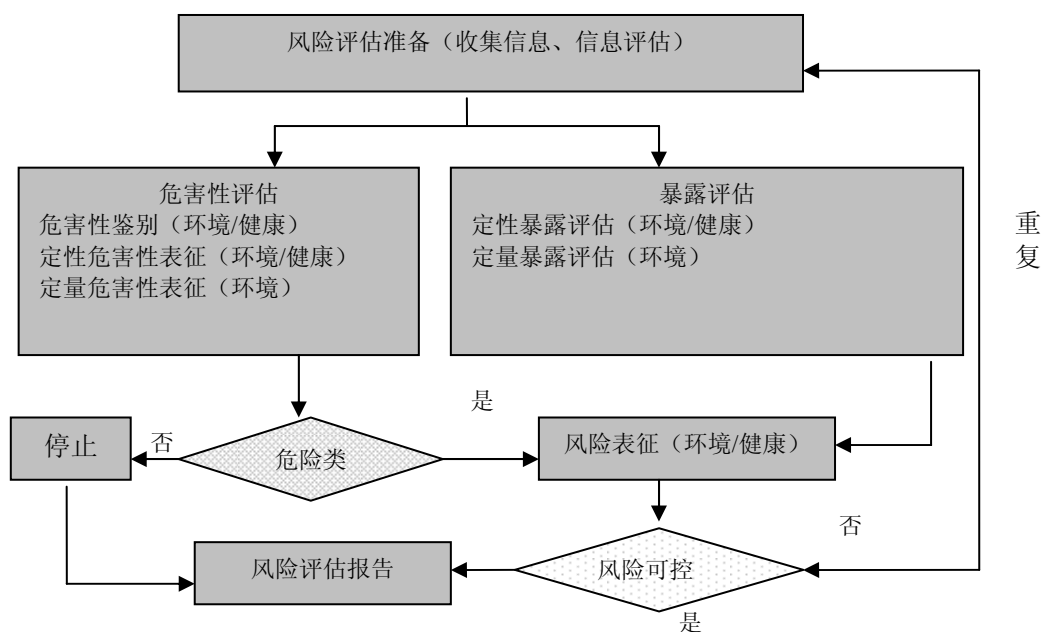


图 4.1. 化学物质风险评估技术流程

4.2 其他

4.2.1 在开展风险评估前应收集化学物质的信息（物质标志信息、危害性信息、暴露信息等），并评估信息的质量（主要评估数据有效性、可靠性、相关性和充分性，数据评估可参照 HJ 154 的规定）。

4.2.2 若化学物质的数据不能反映其某些特性，而无法完成风险评估时，应补充数据后完成风险评估。

4.2.3 具有环境持久性、生物累积性和毒性的化学物质（PBT 和 vPvB）风险评估方法参见附录 A。

4.2.4 特殊类别化学物质的风险评估，应针对具体情况个案处理。

5 定性环境风险评估

5.1 定性环境危害性评估

5.1.1 工作内容

定性危害性评估包括危害性鉴别、定性危害性表征（危害性分级）两部分。通过危害性鉴别，确定化学物质由于其固有特性造成的生态环境危害；通过危害性表征（危害性分级），定性预测化学物质对生态环境的危害级别。

5.1.2 危害性鉴别

1) 收集化学物质的生态毒理学数据，并对数据进行评估，明确应关注的生态毒理学效应，并确定相应的危害剂量。

2) 根据危害剂量，按照 GB 20602 的规定，给出化学物质对环境的危害性分类。新化学物质的环境危害性鉴别应遵从 HJ 154 的规定。

5.1.3 定性危害性表征（危害性分级）

对 5.1.2 危害性鉴别的结果，采用分级赋分的方法，定性确定环境危害性的级别及相应级别分值。

环境危害性分为高危害、中危害、低危害三个级别，分级规定和赋分值（HAZARD_{environment}）见表 1。

表 1 水环境危害性分级

危害性级别 (分值 HAZARD _{environment})	环境危害性分类
高危害 (3 分)	水生急性毒性 1 类或水生慢性毒性 1、2 类
中危害 (2 分)	水生急性毒性 2 类或水生慢性毒性 3 类
低危害 (1 分)	水生急性毒性 3 类或水生慢性毒性 4 类

5.2 定性环境暴露评估

5.2.1 工作内容

定性环境暴露评估包括确定暴露评估因子、暴露评估因子评分和环境暴露分级三部分工作。

5.2.2 确定暴露评估因子

暴露评估因子包括化学物质的数量、释放到环境中的潜在可能性和释放到环境的残留时间三个因子。

5.2.3 暴露评估因子评分

暴露评估因子中，释放到环境中的潜在可能性以化学物质的使用方式表示；释放到环境的残留时间以化学物质的环境半衰期为指标，可通过生物降解试验获得，对于不可生物降解的化学物质，需考虑水解和光解等非生物降解过程。

暴露评估因子评分规定见表 2~4。

表 2 生产/进口量评分

数量 (t)	1~10	10~1000	>1000
分值	1	2	3

表 3 释放到环境的可能性评分

使用方式	封闭系统中使用 (中间体)	作为基体内含物使用	集中使用	广泛分散使用
分值	0	1	2	3

注：作为基体内含物使用：是指化学物质物理或化学的键合在基体之内或表面，在所有的过程中都会结合在产品或物品中，不会释放入环境。

表 4 释放到环境后残留时间评分

半衰期 (d)	<15	15-50	50-150	>150
降解性	可快速生物降解	可快速生物降解，但 10 天内降解率小于 10%	可固有生物降解	不可降解
分值	1	2	3	4

5.2.4 环境暴露分级

根据 5.2.3 中三项暴露评估因子的评分结果，以叠加方式计算，求得环境暴露水平总分值（T_{exposure}），根据总分值给出环境暴露级别和赋分值（EXPOSURE_{environment}），环境暴露分级规定见表 5。

$$T_{\text{exposure}} = a + b + c$$

(1)

式中：T_{exposure}——环境暴露水平总分值，无量纲；

- a——生产/进口量分值，无量纲；
- b——环境释放分值，无量纲；
- c——残留时间分值，无量纲。

表 5 定性环境暴露分级

环境暴露级别 (分值)	环境暴露总分值 (T _{exposure})
高暴露 (3 分)	≥8
中暴露 (2 分)	5-7
低暴露 (1 分)	≤4

5.3 定性环境风险表征

5.3.1 基本方法

根据 5.1 和 5.2 得出的分级赋分结果，按照公式(2)计算环境风险级别总分值 RC_{environment}，确定环境风险级别。

环境风险分为高风险、中风险、低风险三个级别，风险级别划分规定见表 6。

$$RC_{environment} = HAZARD_{environment} \times EXPOSURE_{environment} \quad (2)$$

式中：RC_{environment}——环境风险级别总分值，无量纲；

HAZARD_{environment}——环境危害性分级赋分值，无量纲；

EXPOSURE_{environment}——环境暴露分级赋分值，无量纲。

表 6 环境风险级别划分

风险级别	环境风险级别总分值
高风险	9-6 分
中风险	5-3 分
低风险	2-1 分

5.3.2 定性环境风险表征结论

根据定性环境风险表征结果，给出化学物质属于环境高风险、中风险和低风险的评估结论。

定性环境风险评估结果为环境中风险时，应评估风险控制措施的适当性。

定性环境风险评估结果为环境高风险时，应对风险控制措施进行评估，若风险无法降低，应增加风险控制措施或获取更多的危害性信息重新进行风险评估。

6 定量环境风险评估

6.1 工作内容

定量环境风险评估包括化学物质对局部水环境、局部地表水下沉积物环境、污水处理厂微生物环境、局部土壤环境、局部地下水环境和局部大气环境的环境风险评估方法。

6.2 环境危害性评估

危害性评估包括危害性鉴别与定量危害性表征两个工作步骤。通过危害性鉴别，确定化学物质由于其固有特性造成的生态环境危害；通过定量危害性表征，定量计算化学物质对目标环境介质的预测无效应浓度 (PNEC)。

6.2.1 危害性鉴别

危害性鉴别的工作内容同 5.1.2。

6.2.2 定量危害性表征

6.2.2.1 基本要求

定量危害性表征应采用评估系数等数据外推方法,对危害性鉴别确定的危害性数据进行数据外推,计算目标环境介质的预测环境无效应浓度(PNEC)。

在采用评估系数进行数据外推时,应充分考虑单一物种的实验室数据外推到多物种生态系统过程中的多种不确定性因素,主要包括:毒性数据的实验室内与实验室外差异,种内和种间生物学差异,短期毒性向长期毒性外推的不确定性,实验室数据向野外环境外推的不确定性。当可以获得多个物种试验数据时,应采用其中最敏感种的数据进行外推。

6.2.2.2 水环境危害性表征

1) 工作目标

化学物质对水环境的危害是指化学物质由于生产、加工使用过程中废水排放对水体环境产生的危害效应,通过计算对水体环境的预测环境无效应浓度(PNEC_{water}),预测化学物质对水环境的潜在危害。

2) PNEC_{water} 计算方法

计算 PNEC_{water} 时,应满足如下假设条件:

生态系统的敏感性由生态系统中的最敏感物种表征;

若生态系统的结构受到保护,生态系统的功能就可以得到保护。

基于上述假设,对危害性鉴别获得的生态毒理学数据,应选择数据中的最低半数致死(效应)浓度(L(E)C₅₀)或无可见效应浓度(NOEC)值除以评估系数,计算得出 PNEC_{water}。推荐评估系数见表 7。

表 7 推导 PNEC_{water} 的推荐评估系数

数据要求	评估系数
三个营养级别生物每一级至少有一项短期 L(E)C ₅₀	1000 ⁽¹⁾
一项长期试验的 NOEC	100 ⁽²⁾
两个营养级别的两个种的长期 NOEC	50 ⁽³⁾
三个营养级别的至少三个种的长期 NOEC	10 ⁽⁴⁾
野外数据或模拟生态系统	视情况而定(1-5)

注⁽¹⁾只有短期毒性数据时,采用最低值除以评估系数 1000 外推 PNEC。若给定化学物质在进行数据外推过程中,有一种不确定性在总的不确定性中所占的比例最大,此时需对评估系数进行修正,根据证据权重,增大或减小评估系数。存在间歇式排放的化学物质通过短期毒性试验外推 PNEC,评估系数不可低于 100。

⁽²⁾可以获得一项长期 NOEC 值时,若试验生物通过短期毒性试验证明为最敏感种,则采用评估系数 100 外推 PNEC。若试验生物通过短期试验证明不是最敏感种,则 PNEC 应采用短期试验数据除以评估系数 1000 计算。

⁽³⁾可以获得两个营养级别两个物种的长期 NOEC 值时,若试验生物能通过短期试验证明其中一种生物为最敏感种,则采用两项长期 NOEC 值中的最低值除以评估系数 50 外推 PNEC;若试验生物通过短期试验证明均非最敏感种时,则采用两项长期 NOEC 中的最低值除以 100 外推 PNEC。

⁽⁴⁾评估系数 10 仅适用于三个物种的三个营养级别的至少三项长期试验。

6.2.2.3 地表水下沉积物环境危害性表征

1) 工作目标

化学物质对地表水下沉积物环境的危害,是指化学物质吸附于悬浮物质后通过沉降作用进入沉积物环境,产生的危害效应。通过计算沉积物环境预测无效应浓度(PNEC_{sed}),预测化学物质对地表水下沉积物环境的潜在危害。

2) PNEC_{sed} 计算方法的选择

计算 PNEC_{sed} 时,考虑获取数据的具体情况,选用不同方法计算 PNEC_{sed};

若无法获得沉积物环境中生活生物的生态毒理学数据,应采用平衡分配法计算 PNEC_{sed},该方法仅作为初步筛选方法;

若能获得沉积物环境中生活生物长期毒性数据,应采用评估系数法计算 PNEC_{sed};

若仅能够获得沉积物环境中生活生物的短期毒性数据,PNEC_{sed} 的确定要同时考虑评估系数法(以最敏感种数据除以评价系数 1000 计算)和平衡分配法得出的结果,取两者中的最低 PNEC_{sed} 值用于风险表征。

3) 平衡分配法计算 $PNEC_{sed}$

采用平衡分配法计算 $PNEC_{sed}$ 时，首先应满足如下假设条件：

沉积物环境中生活的生物与水体中生活的生物对化学物质的敏感性相同；

化学物质在沉积物、孔隙水以及底栖生物体内的浓度具有热力学平衡，任意一相中的浓度可以通过分配系数进行预测。

基于上述假设，采用公式（3）计算 $PNEC_{sed}$ ，

$$PNEC_{sed} = \frac{K_{susp-water}}{RHO_{susp}} \cdot PNEC_{water} \cdot 1000 \quad (3)$$

式中： $PNEC_{sed}$ ——沉积物环境预测无效应浓度， $mg \cdot kg^{-1}$

$PNEC_{water}$ ——水环境预测无效应浓度， $mg \cdot L^{-1}$ ；

RHO_{susp} ——悬浮物容重， $kg \cdot m^{-3}$ ；

$K_{susp-water}$ ——悬浮物-水分配系数， $m^3 \cdot m^{-3}$ ，计算方法见公式（B.5）。

平衡分配法计算 $PNEC_{sed}$ 主要适用于 $\log Kow$ 值小于 5 的化学物质，对于 $\log Kow$ 大于 5 的化学物质若采用平衡分配法计算 $PNEC_{sed}$ ，应除以系数 10 对结果进行修正。

4) 评估系数法计算 $PNEC_{sed}$

采用评估系数外推方法计算 $PNEC_{sed}$ 时，应选择试验数据中的最低无可见效应浓度

（NOEC）或 10% 效应浓度（ EC_{10} ）值除以评估系数，计算得出 $PNEC_{sed}$ 。推荐评估系数见表 8。若只能获得短期数据，可用评估系数 1000 外推 $PNEC_{sed}$ 。

表 8 推导 $PNEC_{sed}$ 的推荐评估系数

数据要求	推荐评估系数
一项长期试验（NOEC或 EC_{10} ）	100
代表不同食性以及生活方式的物种两项长期试验（NOEC或 EC_{10} ）	50
代表不同食性以及生活方式的物种三项长期试验（NOEC或 EC_{10} ）	10

6.2.2.4 污水处理厂微生物环境危害性表征

1) 工作目标

化学物质对污水处理厂微生物环境的危害，是指化学物质由于废水排放进入污水处理厂，对污水处理厂微生物环境产生的危害效应。通过推导化学物质对微生物预测无效应浓度（ $PNEC_{microorganisms}$ ），预测化学物质对污水处理厂微生物系统的潜在危害。

2) $PNEC_{microorganisms}$ 计算方法

对危害性鉴别获得的活性污泥的毒性数据，选取相应的评估系数进行数据外推，计算 $PNEC_{microorganisms}$ 。推荐评估系数见表 9。

表 9 推导 $PNEC_{microorganisms}$ 的推荐评估系数

数据要求	推荐评估系数
活性污泥呼吸抑制试验（NOEC or EC_{10} ）	10
活性污泥呼吸抑制试验（ EC_{50} ）	100
标准降解试验的抑制控制 --快速生物降解试验(化学物质对接种物的毒性NOEC) --固有生物降解试验(化学物质对接种物的毒性 NOEC)	10
小规模活性污泥模拟试验 (不会影响连续活性污泥单元功能的试验浓度，可视为对污水处理厂微生物的 NOEC 值，主要依据专家对每一案例的专业判断)	视实际情况，最低为 1

3) $PNEC_{microorganisms}$ 的修正

采用评估系数法计算 $PNEC_{microorganisms}$ 用于风险表征时，若风险表征（PEC/ $PNEC$ ）结果大于 1，应针对下列具体情况对 $PNEC_{microorganisms}$ 进行修正：

若仅有活性污泥呼吸抑制试验数据，且 PEC/PNEC 值大于 1，应采用评估的污水处理厂的污泥重新进行活性污泥呼吸抑制试验，对评估结果进行修正。

若评估对象为生活污水处理厂，不能采用处理工业污水的污泥开展活性污泥呼吸抑制试验。

若已开展活性污泥呼吸抑制试验、标准生物降解试验以及小规模污泥模拟试验，且 PEC/PNEC 值大于 1，应采用评估的污水处理厂的污泥重新进行小规模污泥模拟试验，对评估结果进行修正。

6.2.2.5 土壤环境危害性表征

1) 工作目标

化学物质对土壤环境的危害，是指污水处理厂污泥在农用土壤中的施用及大气沉降造成的污染源，对土壤环境产生的危害效应。通过推导化学物质对土壤环境的预测无效应浓度 $PNEC_{soil}$ ，预测化学物质对土壤环境的危害性。

2) 数据校正

生物对化学物质的生物利用率以及化学物质对生物的毒性效应均与土壤性质有关，采用不同类型土壤开展毒性试验获得的试验数据不能直接进行比较，应先将毒性数据校正为标准土壤毒性数据，然后再计算 $PNEC_{soil}$ 。

在进行数据校正时，假设：非离子有机化合物生物吸收量由有机质含量决定。基于假设，土壤 NOEC 或 LC_{50} 值采用公式（4）校正：

$$NOEC \text{ 或 } L(E) C_{50(\text{standard})} = NOEC \text{ 或 } L(E) C_{50(\text{exp})} \cdot \frac{Fom_{soil(\text{standard})}}{Fom_{soil(\text{exp})}} \quad (4)$$

式中：NOEC 或 $L(E)C_{50(\text{standard})}$ ——标准土壤的 NOEC 或 $L(E)C_{50}$ ， $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ ；

NOEC 或 $L(E)C_{50(\text{exp})}$ ——试验土壤的 NOEC 或 $L(E)C_{50}$ ， $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ ；

$Fom_{soil(\text{standard})}$ ——标准土壤中有有机质的比率， $\text{kg}\cdot\text{kg}^{-1}$ ，默认为 3.4%；

$Fom_{soil(\text{exp})}$ ——试验土壤中的有机质比率， $\text{kg}\cdot\text{kg}^{-1}$ 。

3) $PNEC_{soil}$ 计算方法的选择

计算 $PNEC_{soil}$ 时，考虑获取数据的具体情况，选用不同方法计算 $PNEC_{soil}$ ；

若无法获得土壤环境中生物的生态毒理学数据，应采用平衡分配法计算 $PNEC_{soil}$ ，该方法仅可作为初级筛选方法；

若可以获得有关土壤环境中生产者、消费者或分解者的生态毒理学数据，应采用评估系数法推导 $PNEC_{soil}$ ；

若仅能够获得土壤中生活的一种生物试验结果， $PNEC_{soil}$ 的确定要同时考虑评估系数法以及平衡分配法的计算结果，取两者中的最低 $PNEC_{soil}$ 值用于风险表征。

4) 平衡分配法计算 $PNEC_{soil}$

采用平衡分配法计算 $PNEC_{soil}$ 时，不考虑吸附于土壤颗粒的化学物质被生物摄入的效应。平衡分配法不适用于脂溶性化学物质。

基于上述前提， $PNEC_{soil}$ 采用公式（5）计算：

$$PNEC_{soil} = \frac{K_{soil-water}}{RHO_{soil}} \cdot PNEC_{water} \cdot 1000 \quad (5)$$

式中： $PNEC_{soil}$ ——土壤环境预测无效应浓度， $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ ；

$PNEC_{water}$ ——水环境预测无效应浓度， $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ；

RHO_{soil} ——土壤容重， $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ ；

$K_{soil-water}$ ——土壤-水分配系数， $\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$ ，计算方法见公式（B.5）。

对于 $\log Kow$ 大于 5 的化学物质， $PNEC_{soil}$ 应除以评估系数 10 进行修正。若通过平衡分配法计算得出的 $PEC_{soil}/PNEC_{soil}$ 值大于 1，则化学物质对土壤环境的危害性，应采用土壤中的生物毒性数据进行评估。

5) 评估系数法计算 $PNEC_{soil}$

采用评估系数法计算土壤环境的 $PNEC_{soil}$ ，应采用化学物质对土壤环境中生物的毒性试验数据最低值，除以评估系数，计算得出 $PNEC_{soil}$ 。推荐评估系数见表 10。

表 10 推导 $PNEC_{soil}$ 的推荐评估系数

数据要求	推荐评估系数
一项短期毒性试验的 $L(E)C_{50}$ 值（如植物、蚯蚓或微生物）	1000
一项长期毒性试验的 NOEC 值（如植物）	100
两个营养水平的两项长期毒性试验的 NOEC 值	50
三个营养水平的三个物种三项长期毒性试验的 NOEC 值	10
野外数据或模拟生态系统数据	视实际情况确定

6.2.2.6 大气环境危害性表征

1) 工作目标

化学物质对大气环境的危害主要是指化学物质在生产、加工使用过程中，进入大气环境后造成的污染源，对大气环境产生的危害效应。包括生物和非生物两方面的危害效应。

2) $PNEC_{air}$ 计算

化学物质对大气环境的生物效应指生物吸入空气中的化学物质，所产生的毒性效应。目前尚缺少相应的毒性试验方法评估化学物质对生物的危害效应。化学物质对大气环境的非生物效应指化学物质进入大气环境后导致的全球变暖、平流层的臭氧破坏、对流层的臭氧生成以及酸化作用，评估方法主要采用专家判断。考虑上述情况，目前不要求对大气环境进行定量危害性评估。对于仅具有臭氧危害性的化学物质，只需完成危害性鉴别分类即可。

6.3 环境暴露评估

6.3.1 工作内容

环境暴露评估主要考虑化学物质生产、配制/加工、使用后对周边局部环境的暴露。

工作内容包括建立暴露场景，预测化学物质对目标环境介质暴露的局部环境浓度，评估监测数据和确定环境暴露浓度。

6.3.2 建立暴露场景

建立暴露场景的目的是确定化学物质的使用条件（包括化学物质基本信息、化学物质使用过程的描述，操作条件和风险管理措施等），用于环境排放量的计算和暴露浓度预测。

应针对化学物质生命周期所涉及的生产、配制/加工、使用等过程建立暴露场景。建立暴露场景基本信息需求见表11。

根据初始信息构建的暴露场景为初始暴露场景，用于风险评估。经风险评估或重复风险评估，确保风险可以控制时，确定的暴露场景为最终暴露场景。

表11 建立暴露场景的信息需求

类别	信息
基本信息	化学物质性质信息（如：分子量、熔点、沸点、蒸汽压、辛醇-水分配系数、水溶性、稳定性等）
过程描述	化学物质生命周期阶段（如：化学物质的生产、配制/加工、使用等阶段） 化学物质的过程类型（如：行业类型、使用方式、主要用途、暴露途径等）
操作条件	使用的持续时间、使用的频率
	使用的技术条件（如：工艺流程、工艺污染程度、环境条件等）
	化学物质或配制品的物理形态
	化学物质生产、使用活动的用量和排放量
	化学物质在配制品或物品中的浓度
其他与使用相关的操作条件（如：受体环境的容纳能力，主要指污水处理厂或河流的水流量等）	
风险管理措施	与环境相关的风险管理措施（如：生产/使用过程中所有含化学物质的废水、废气、固体废物的处理方法、设备、去除率等）

6.3.3 预测局部环境浓度

6.3.3.1 基本要求

局部预测环境浓度（PEC_{local}）是指化学物质点源排放对局部环境暴露的预测浓度。暴露浓度预测，以“最坏情况假设”为前提，对环境暴露进行保守估计。暴露浓度预测完成后，应对暴露浓度预测过程中采用的模型工具或选择的暴露参数带来的不确定性，加以解释。

6.3.3.2 预测污水处理厂微生物环境浓度

1) 工作目标

通过模型公式计算，获得化学物质通过废水排放进入污水处理厂后，在污水处理厂微生物环境中的预测浓度（PEC_{stp}），用于污水处理厂微生物环境的风险评估。

2) 污水处理厂微生物环境预测浓度（PEC_{stp}）计算

计算 PEC_{stp} 时，应满足如下假设条件：

只有溶解于水的化学物质才可以被生物利用；

污水处理厂中各池内（包括曝气池）化学物质状态稳定且均匀混合。

基于上述假设，污水处理厂微生物环境暴露浓度（即化学物质溶解浓度）与污水处理厂废水处理出水后出水中化学物质浓度相等，PEC_{stp} 采用公式（6）计算：

$$PEC_{stp} = \frac{E_{local_water} \cdot 10^6}{EFFLUENT_{stp}} \cdot F_{stp_water} \quad (6)$$

式中：PEC_{stp}——污水处理厂微生物环境预测浓度，mg·l⁻¹；

E_{local_{water}}——进入污水处理厂的（废）水中化学物质的日排放量，kg·d⁻¹，计算方法见附录 B.2；

EFFLUENT_{stp}——污水处理厂出水量，l·d⁻¹；

F_{stp_{water}}——经由污水处理厂排放的化学物质进入水相的比例，无量纲，取值见 B3.1。

6.3.3.3 预测局部水环境浓度

1) 工作目标

通过模型公式计算，获得化学物质排放进入水体环境后，在局部水体环境中的预测浓度（PEC_{local_{water}}），用于水生生态系统的环境风险评估。

计算时，主要考虑污水处理厂向水体的排放、受纳水体的稀释作用，以及受纳水体中悬浮物的吸附作用。

2) 排放阶段局部水环境化学物质浓度（C_{local_{water}}）计算

在计算 C_{local_{water}} 时，应满足如下假设条件：

污水处理厂的出水进入地表水并完全混合，以此代表水生态系统暴露情况；

进行局部水环境暴露评估，忽略化学物质的挥发、降解以及沉积作用。

基于上述假设，C_{local_{water}} 按照公式（7）计算：

$$C_{local_water} = \frac{E_{local_water} \cdot F_{stp_water} \cdot 10^6}{(EFFLUENT_{stp} + FLOW)(1 + K_{p_susp} \cdot SUSP_{water} \cdot 10^{-6})} \quad (7)$$

式中：C_{local_{water}}——排放阶段局部水环境中化学物质浓度，mg·l⁻¹；

E_{local_{water}}——进入污水处理厂的废水中化学物质的日排放量，kg·d⁻¹，计算方法见附录 B.2；

EFFLUENT_{stp}——污水处理厂出水量，l·d⁻¹；

FLOW——受纳河流流量，l·d⁻¹（若无法获得该数据，则采用最保守的默认值，即假设河流的流量为 0）。

F_{stp_{water}}——经由污水处理厂排放的化学物质进入水相的比例，无量纲，取值见 B3.1（对于不经污水处理厂直接排入河流的情况，则取 F_{stp_{water}}=1）。

$K_{p_{susp}}$ ——悬浮物中固-水分配系数, $l \cdot kg^{-1}$, 计算方法见公式 (B.1);
 $SUSP_{water}$ ——河流中悬浮物质的浓度, $mg \cdot l^{-1}$ 。

3) 局部水环境预测浓度 ($PEC_{local_{water}}$) 计算

$$PEC_{local_{water}} = C_{local_{water}} + PEC_{regional_{water}} \quad (8)$$

式中: $PEC_{local_{water}}$ ——局部水环境预测浓度, $mg \cdot l^{-1}$;
 $C_{local_{water}}$ ——排放阶段局部水环境中化学物质浓度, $mg \cdot l^{-1}$
 $PEC_{regional_{water}}$ ——区域水环境背景浓度, $mg \cdot l^{-1}$, 新化学物质区域环境背景浓度假设可忽略, 现有化学物质环境背景浓度由数据监测获得。

6.3.3.4 预测局部沉积物环境浓度

1) 工作目标

通过模型公式计算, 获得化学物质进入地表水下沉积物环境后, 在局部地表水下沉积物环境中的预测浓度 ($PEC_{local_{sed}}$), 用于沉积物环境的风险评估。

2) 局部沉积物环境预测浓度 ($PEC_{local_{sed}}$) 计算

在计算 $C_{local_{sed}}$ 时, 应满足如下假设条件:

沉积物环境中的化学物质暴露主要来源于局部水体环境中悬浮物的沉降作用,

沉积物环境中化学物质的预测浓度可借助于悬浮物质中化学物质的浓度进行计算。

基于上述假设, 根据热力学分配平衡, 沉积物中化学物质浓度可以通过水体环境中化学物质浓度推算得到, $PEC_{local_{sed}}$ 采用公式 (9) 计算:

$$PEC_{local_{sed}} = \frac{K_{susp-water}}{RHO_{susp}} \cdot PEC_{local_{water}} \cdot 1000 \quad (9)$$

式中: $PEC_{local_{sed}}$ ——局部沉积物环境预测浓度, $mg \cdot kg^{-1}$;
 $PEC_{local_{water}}$ ——局部水环境预测浓度, $mg \cdot l^{-1}$; 计算方法见公式 (8);
 $K_{susp-water}$ ——悬浮物质-水分配系数, $m^3 \cdot m^{-3}$, 计算方法见公式 (B.5);
 RHO_{susp} ——悬浮物质容重, $kg \cdot m^{-3}$ 。

6.3.3.5 预测局部土壤环境浓度

1) 工作目标

通过模型公式计算, 获得局部农用土壤环境的预测浓度作为局部土壤环境预测浓度 ($PEC_{local_{soil}}$) 的最保守估计, 用于陆生生态系统的风险评估, 以及人体间接暴露 (食用农作物暴露途径) 的风险评估。

2) 局部土壤环境中化学物质浓度计算 ($C_{local_{soil}}$)

计算 $C_{local_{soil}}$ 时, 对农业土壤暴露进行如下“最坏情况”假设:

农用土壤中化学物质暴露, 主要来源于污水处理厂污泥 10 年的施用, 和附近点源持续性的大气沉降, 不考虑化学物质的直接使用对土壤造成的暴露;

以 10 年后一段时间内的平均浓度表征 $C_{local_{soil}}$, 进行陆地生态系统风险评估, 取 10 年后 30 天平均值; 进行人类间接暴露风险评估, 取 10 年后 180 天平均值计算;

农用土壤的污泥施用率每年一次, 施用量(以干污泥计) $0.5 \text{ kg}_{dwt} \cdot m^{-2} \cdot yr^{-1}$;

大气干湿沉降的贡献基于化学物质局部点源排放, 并限于点源附近 1000m 内地区, 以全年平均值计。

基于上述假设, 污泥施用及大气沉降持续 10 年后, 一段时间 (T) 内, 局部土壤环境中化学物质的平均浓度采用公式 (10) 计算:

$$C_{local_{soil}} = \frac{D_{air}}{k} + \frac{1}{kT} [C_{soil10}(0) - \frac{D_{air}}{k}] \cdot [1 - e^{-kT}] \quad (10)$$

式中: $C_{local_{soil}}$ ——局部土壤环境中化学物质平均浓度, $mg \cdot kg^{-1}$;
 D_{air} ——每千克土壤的空气沉降通量, $mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$, 计算方法见公式 (B.15);
T——时间, d, 陆地生态系统风险评估, T 默认为 30 天; 人类间接暴露风险评估 T 默认为 180 天;

k ——土壤中化学物质消除的一级反应速率常数， d^{-1} ，计算方法见公式 (B.16)；
 $C_{soil10}(0)$ ——污泥施用及大气沉降持续 10 年后 0 时刻，土壤中化学物质浓度， $mg \cdot kg^{-1}$ ，计算方法见公式 (B.19)。

3) 局部土壤环境预测浓度计算 ($PEC_{local,soil}$)；

$$PEC_{local,soil} = C_{local,soil} + PEC_{regional,naturalsoil} \quad (11)$$

式中： $PEC_{local,soil}$ ——局部土壤环境预测浓度， $mg \cdot kg^{-1}$ ；
 $C_{local,soil}$ ——局部土壤环境中化学物质平均浓度， $mg \cdot kg^{-1}$ ；
 $PEC_{regional,naturalsoil}$ ——区域自然土壤环境背景浓度， $mg \cdot kg^{-1}$ ，新化学物质区域自然土壤环境背景浓度假设可忽略，现有化学物质的区域自然土壤环境背景浓度由数据监测获得。

6.3.3.6 预测局部地下水环境暴露浓度

1) 工作目标

通过计算，获得化学物质在局部农用土壤地下水环境中的预测浓度 ($PEC_{local,grw}$)，用于人体间接暴露（饮用水暴露途径）的风险评估。

2) 局部地下水环境预测浓度计算

基于“最坏情况”假设：土壤中水相化学物质浓度即为地下水中化学物质浓度 $PEC_{local,grw}$ 采用公式 (12) 计算：

$$PEC_{local,grw} = \frac{PEC_{local,soil} \cdot RHO_{soil}}{K_{soil-water} \cdot 1000} \quad (12)$$

式中： $PEC_{local,grw}$ ——局部地下水环境预测浓度， $mg \cdot l^{-1}$ ；
 $PEC_{local,soil}$ ——局部土壤环境预测浓度， $mg \cdot kg^{-1}$ ，计算方法见公式 (11)；
 RHO_{soil} ——土壤容重， $kg \cdot m^{-3}$ ；
 $K_{soil-water}$ ——土壤-水分配系数， $m^3 \cdot m^{-3}$ ，计算方法见公式 (B.5)。

6.3.3.7 预测局部大气环境浓度

1) 工作目标

通过计算，获得化学物质在局部大气环境中的预测浓度 ($PEC_{local,air}$)，用于人类间接暴露（吸入空气暴露途径）的风险评估。

2) 局部大气环境化学物质浓度计算 ($C_{local,air,ann}$)

局部大气环境化学物质浓度以距离源头 100m 处的年平均浓度计算。

大气环境的化学物质输入，来源于点源向局部大气的直接排放和污水处理厂的挥发。取二者中较大值作为大气环境化学物质的输入量来计算年平均浓度，计算方法见公式 (13)：

$$C_{local,air,ann} = \max(E_{local,air}, Estp_{air}) \cdot C_{std,air} \cdot \frac{Temission}{365} \quad (13)$$

式中： $C_{local,air,ann}$ ——局部大气环境化学物质年平均浓度， $mg \cdot m^{-3}$ ；
 $E_{local,air}$ ——点源向局部大气环境直接排放的日排放量， $kg \cdot d^{-1}$ ，计算方法见附录 B.2；
 $Estp_{air}$ ——污水处理厂向大气环境间接排放的日排放量， $kg \cdot d^{-1}$ ，计算方法见公式 (B.10)；
 $C_{std,air}$ ——源强 $1 kg \cdot d^{-1}$ 的空气中化学物质浓度， $mg \cdot m^{-3}$ ；
 $Temission$ ——每年排放天数， $d \cdot yr^{-1}$ 。

3) 局部大气环境预测浓度计算 ($PEC_{local,air}$)

$$PEC_{local,air,ann} = C_{local,air,ann} + PEC_{regional,air} \quad (14)$$

式中： $PEC_{local,air,ann}$ ——局部大气环境预测年平均浓度， $mg \cdot m^{-3}$ ；
 $C_{local,air,ann}$ ——局部大气环境化学物质年平均浓度， $mg \cdot m^{-3}$ ，计算方法见公式 (13)；

PEC_{regional,air}——区域大气环境背景浓度，mg·m⁻³，新化学物质区域大气环境背景浓度假设可忽略，现有化学物质的区域环境背景浓度由数据监测获得。

6.3.4 评估监测数据

现有化学物质的暴露评估除采用模型公式预测外，还可采用监测数据计算，监测数据主要来自于水、沉积物、土壤和大气环境，这些数据应依照如下程序评估，用于计算实际的环境暴露浓度：

1)详细评估采样和分析方法以及监测活动的时空尺度，确定可靠、有代表性数据。

2)充分考虑暴露来源以及化学物质在环境中的迁移转化，将监测数据分配到假定的局部地区或区域。

3)在风险表征时，将数据监测与暴露预测获得的暴露预测浓度（PEC）进行比较分析，按照 6.3.5 的规定，选择有代表性的 PEC 值用于风险表征。

6.3.5 确定环境暴露浓度

对于现有化学物质，如果 PEC 可以通过数据监测和暴露预测（模型公式计算）同时获得，应对两类数据进行比较。如果两类数据不在同一个数量级上，应分析讨论偏离，并针对下述不同情况，确定环境暴露浓度：

计算 PEC 近似基于监测的 PEC 表明，最重要的暴露源都进行了充分的考虑。进行风险评估时采用最可信的结果；

计算 PEC 大于基于监测的 PEC 表明，在进行 PEC 模型计算中没有考虑物质的削减过程或者采用的模型不能反应真实的环境条件。此外，也可能是监测数据不可靠或仅代表了环境背景浓度或区域环境浓度。若 PEC 是基于充分有代表性的监测数据计算得出，则可以不考虑模型计算结果；若暴露场景是基于更为真实的环境条件构建，则可以考虑采用模型计算的 PEC 值进行风险评估。

计算 PEC 小于基于监测的 PEC，可能是因为计算 PEC 时忽略了相关的排放源或采用了不适合的模型。也可能是近期使用方式的改变或减排措施的增加，其效果还未体现到监测样本中。

此外，还有一些其他原因可能导致 PEC 的偏离，包括存在自然排放源；化学物质可能会代谢为其他稳定的代谢产物；由于与其他环境介质的联合作用而阻碍了进一步的迁移。若基于监测的 PEC 值已进行了严格的统计学或几何评估，其数据具有较高可信度，则可以替代计算 PEC 值。

6.4 环境风险表征

6.4.1 基本方法

在完成环境危害性评估和环境暴露评估后，将预测环境浓度(PEC)与相应的预测无效应浓度（PNEC）进行比较，获得风险商值（RCR）表征环境风险，计算方法见公式(15)。

$$RCR = \frac{PEC}{PNEC} \quad (15)$$

式中：RCR——风险商，无量纲；

PEC——预测环境浓度；

PNEC——预测无效应浓度。

环境风险表征应针对每一个暴露场景开展，以保证操作条件和风险控制措施能够使化学物质的风险得到控制。

6.4.2 工作步骤

环境风险表征按照如下步骤进行：

1) 针对不同环境介质，分别确定 RCR 值；

2) 计算组合在一起的所有暴露的风险商总和；

3) 考虑评估中的不确定性, 根据风险表征的结果, 确定是否需要进一步的信息或测试, 对风险表征的结果进行修正;

4) 给出风险表征结论。

6.4.3 不确定性分析

化学物质危害评估、暴露评估、风险表征都涉及对某些参数、数值和假设的推导或估算, 这些过程的每个阶段都存在不确定性。当下列情况出现时应应对风险评估过程进行不确定性分析(不确定性分析方法见附录 C):

若 RCR 大于 1, 则有必要对风险评估进行改进, 不确定性分析可以帮助风险评估者识别和锁定不确定性的主要来源, 明确后续风险评估过程中应加以改进的内容。

当使用了非标准性的、非指导性的方法进行风险评估后, 风险评估者应将不确定性分析作为支持文件的一部分, 以证明非标准性的风险评估方法的使用是否适当。

若 RCR 低于但接近 1, 且按本标准的要求使用了标准的风险评估方法, 风险评估者也可以通过进行定性不确定性分析, 确认风险评估过程是否有高估风险的可能。

6.4.4 环境风险表征结果修正方法

1) 降低暴露评估值

降低暴露评估值的途径包括: 细化操作条件或增加风险管理措施; 细化物质用途信息, 以及每个确定用途的吨位, 如使用实际市场数据; 细化受体环境的特性, 如水的流速等; 使用更高级的暴露评估工具; 细化物质的特性, 如降解速率等。

2) 增大危害评估值

通过增加长期毒性的数据, 增加测试的物种等来减小外推系数, 从而增大 PNEC 值。

6.4.5 环境风险表征结论

当 RCR 小于等于 1, 说明化学物质的风险可以控制, 其环境风险可接受。

当 RCR 大于 1, 则应通过提供进一步危害性及暴露信息或采取更为严格的风险控制措施对 PNEC 和 PEC 值重新进行修正。

若经重复风险评估后, 环境风险得到有效控制, 此时的暴露场景确定为最终暴露场景。

若经重复风险评估, 环境风险仍不能被控制, 则风险不可接受。

7 定性健康风险评估

7.1 定性健康危害性评估

7.1.1 工作内容

定性危害性评估包括危害性鉴别和定性危害性表征(危害性分级)两部分内容。通过危害性鉴别, 确定化学物质由于其固有特性造成的人体健康危害; 通过定性危害性表征(危害性分级), 定性预测化学物质对人体健康的危害级别。

7.1.2 危害性鉴别

1) 收集化学物质的危害性数据, 并对数据进行评估, 明确应关注的毒理学效应, 并确定相应的危害剂量。

2) 根据危害剂量, 按照 GB 20592~GB 20599、GB 20601 的规定, 给出化学物质对人体健康的危害性分类。

新化学物质的环境危害性鉴别应按照 HJ 154 的规定。

7.1.3 定性危害性表征(危害性分级)

对危害性鉴别确定的各毒性效应和危害性分类结果, 分别进行危害性分级, 给出各毒性效应的危害性级别及相应级别的分值, 综合健康危害性级别以所有毒性效应指标中最高危害性级别表征。健康危害性分为极高危害、高危害、中危害和低危害四个级别。

各毒性指标危害性分级规定和赋分值(HAZARD_{health})见表12~19。

表 12 经口、吸入、经皮急性毒性分

级

危害性级别 (分值)	急性毒性分类		
	经口 LD ₅₀ (mg/kg)	经皮 LD ₅₀ (mg/kg)	吸入 LC ₅₀ (mg/L)
极高危害 (4分)	急性经口毒性类别 1	急性经皮毒性类别 1	急性吸入毒性类别 1
高危害 (3分)	急性经口毒性类别 2	急性经皮毒性类别 2	急性吸入毒性类别 2
中危害 (2分)	急性经口毒性类别 3	急性经皮毒性类别 3	急性吸入毒性类别 3
低危害 (1)	急性经口毒性类别 4、5	急性经皮毒性类别 4、5	急性吸入毒性类别 4、5

表 13 皮肤刺激性分级

危害性级别 (分值)	皮肤刺激性分类
高危害 (3分)	皮肤腐蚀性类别 1A-1C
中危害 (2分)	皮肤刺激性类别 2
低危害 (1)	皮肤刺激性类别 3

表 14 眼刺激性分级

危害性级别 (分值)	眼刺激危害性分类
高危害 (3分)	眼刺激性类别 1
中危害 (2分)	眼刺激性类别 2A
低危害 (1)	眼刺激性类别 2B

表 15 呼吸和皮肤致敏急性毒性分级

危害性级别 (分值)	呼吸和皮肤致敏危害性分类
高危害 (3分)	呼吸致敏性类别 1
中危害 (2分)	皮肤致敏性类别 1

表 16 致突变性分级^注

危害性级别 (分值)	致突变性分类
极高危害 (4分)	致突变 1 类
高危害 (3分)	致突变性 2 类

注：若因毒代动力学试验结果表明申报化学物质不被吸收或不能到达靶组织(骨髓)等原因而不能提供体内试验数据，则可基于体外试验进行评价。

表 17 生殖/发育毒性分级

危害性级别 (分值)	生殖/发育毒性分类
极高危害 (4分)	生殖/发育毒性 1 类
高危害 (3分)	生殖/发育毒性 2 类

表 18 反复染毒和慢性毒性分级

危害性级别 (分值)	反复染毒和慢性毒性分类
高危害 (3分)	危害性 1 类
中危害 (2分)	危害性 2 类

表 19 致癌性分级标准

危害性级别 (分值)	致癌危害性分类
极高危害 (4分)	致癌性类别 1
高危害 (3分)	致癌性 2 类

7.2 定性健康暴露评估

7.2.1 工作内容

定性健康暴露评估，主要考虑在正常生产、运输、使用等过程中公众暴露以及一般作业场所职业暴露的风险。包括确定暴露评估因子、评估因子分级和人体暴露分级三部分内容。

7.2.2 确定暴露评估因子

暴露评估因子包括暴露和数量两个因子。暴露因子分为与化学物质固有性质有关的因素（A）组、与生产过程有关的因素（B）组和与非生产过程有关的因素（C）组。

7.2.3 评估因子分级方法

7.2.3.1 暴露因子评分

各组暴露因子的评分基准见表 20~22，暴露评分应结合数据要求开展。有缺项时，按该项最高分计算。

表 20 A 组评分基准

影响因素	可能的暴露贡献				权重值 (p_i)	说明
物理化学性质	赋分					
A1 气体	3					
A2 液体(沸点、蒸汽压)	3	2	1	0	3	可通过沸点或蒸汽压判断，满足一个判据即可，若两个判据都满足，取得分高者进行计算。 3 (沸点 < 50℃ 的有机物), 2 (沸点 50~260℃ 的有机物), 1 (沸点 260~400℃ 的有机物), 0 (其他)； 或 3 (蒸汽压 $\geq 10^{-1}$ mmHg 的有机物), 2 (蒸汽压 $10^{-1} \sim 10^{-3}$ mmHg 的有机物), 1 (蒸汽压 $10^{-3} \sim 10^{-5}$ mmHg 的有机物), 0 (其他)
A3 固体(湿/干、粒度)	3	2	1			3 ($\leq 10\mu$ 干), 2 (10~100 μ 干), 1 (>100 μ 干/湿)
A4 溶解度	3	2	1	0		3 (易溶, $> 1000 \text{ mg}\cdot\text{l}^{-1}$), 2 (可溶: $100 \sim 1000 \text{ mg}\cdot\text{l}^{-1}$), 1 (微溶: $0.1 \sim 100 \text{ mg}\cdot\text{l}^{-1}$), 0 (不溶: $< 0.1 \text{ mg}\cdot\text{l}^{-1}$)
A5 溢出或排放时可清除性	3	2	1			3 (不易), 2 (较易), 1 (易)
有利于减少暴露的毒理学性质	赋分				2	
A6 皮肤刺激性	3	2	1			3 (低), 2 (中), 1 (高)
A7 眼刺激性	3	2	1			3 (低), 2 (中), 1 (高)
可检测性	赋分				1	
A8 检测方法的有效性		2	1	0		2 (无方法), 1 (欠准确), 0 (有效)

表 21 B 组评分基准

影响因素	可能的暴露贡献				权重值 (p_i)	说明
生产过程中的暴露	赋分					
B1 吸入化学物质的频率	3	2	1	0	4	3 (弥散空气中), 2 (间歇扩散到空气中), 1 (可以嗅到), 0 (未检出)
B2 工人皮肤与化学物质接触的频率	3	2	1	0	3	3 (持续接触), 2 (间歇接触), 1 (偶尔接触), 0 (不接触)
B3 暴露的持续时间	3	2	1	0		3 (大于 6 小时), 2 (4-6 小时), 1 (小于 4 小时)
生产系统	赋分				2	
B4 生产过程的控制方式		2	1			2 (间歇生产), 1 (连续化生产)
B5 生产作业工况	3	2	1	0		3 (直接使用), 2 (局部通风使用), 1 (隔离使用), 0 (封闭使用)
生产作业场所的污染源	赋分					
B6 化学物质的装载(溢散)		2	1	0		2 (易溢散), 1 (不易溢散), 0 (无溢散)
B7 废气、废水、固体废弃物		2	1	0		2 (有排放), 1 (几乎没有), 0 (无)
B8 渗漏(特别是气液)或固体溢散物		2	1	0		2 (易渗漏), 1 (不易渗漏), 0 (无渗漏)
B9 治理措施					2	
废气的净化		2	1	0		2 (无), 1 (有, 但处理效果一般), 0 (有效)
废水的处理		2	1	0		2 (无), 1 (有, 但处理效果一般), 0 (有效)

固废的处置	2	1	0	2(无), 1(有, 但处理效果一般), 0(有效)
应急预案	2	1	0	2(无), 1(有, 不全面), 0(有效)

表. 22 C组评分基准

影响因素	可能的暴露贡献			权重值 (p_k)	说明	
运输	赋分			2		
C1 容器(特别是液体和气体)	2	1			2(小容器), 1(大容器>1000kg)	
C2 有包装	2	1			2(无), 1(有)	
储存	赋分					
C3 压力情况	2	1	0		2(带压), 1(减压), 0(常压)	
C4 存放条件	3	2	1		3(露天), 2(敞棚), 1(仓库)	
C5 储罐的安全距离	2	1	0		2(不符合要求), 1(基本符合要求), 0(符合要求或不适用)	
使用	赋分					
C6 使用方式	3	2	1		0	3(广泛分散使用), 2(集中使用), 1(作为内含物集中使用), 封闭使用(0)
处置	赋分					
C7 废料扩散情况	2	1	0	2(易扩散), 1(不易扩散), 0(无扩散)		
C8 处理方法如焚烧、存储、再生/再循环/粉碎等	3	2	1	0	3(无合理处置), 2(处理不善), 1(尚可), 0(易)	

7.2.3.2 暴露因子分级

暴露因子的积分(S_{HE})采用加权求和法进行计算。计算方法见公式(16):

$$S_{HE} = A+B+C = \sum A_i p_i + \sum B_j p_j + \sum C_k p_k \quad (16)$$

式中: S_{HE} ——暴露因子积分, 无量纲;

A——A组暴露因子积分, 无量纲;

B——B组暴露因子积分, 无量纲;

C——C组暴露因子积分, 无量纲;

P——权重。

根据暴露因子的积分(S_{HE})与积分最大值(S_{HEmax})的比值(R_E)范围确定暴露因子的分级水平, 即: $R_E = S_{HE} / S_{HEmax}$, $0 < R_E \leq 1$ 。暴露因子分级规定见表23。

表. 23 暴露因子分级规定

暴露因子(R_E)	高	中	低
分级			
分级标准	$R_E \geq 0.70$	$0.40 \leq R_E < 0.70$	$R_E < 0.40$

7.2.3.3 数量因子分级

数量因子共分3级, 数量因子分级规定见表24。

表. 24 数量因子分级规定

数量因子	高	中	低
(Q) 分级			

分级标准	$Q \geq 1000t$	$10t \leq Q < 1000t$	$Q < 10t$
------	----------------	----------------------	-----------

7.2.4 人体暴露分级

综合暴露因子和数量因子的评估结果，定性给出人体暴露级别，人体暴露共分别为极高暴露、高暴露、中暴露和低暴露 4 个级别。人体暴露分级规定及赋分值($EXPOSURE_{health}$)见表 25。

表. 25 定性暴露评估分级

数量因子水平 (Q)	暴露因子水平 (R_E)		
	高	中	低
大	极高暴露 (4 分)	高暴露 (3 分)	中暴露 (2 分)
中	高暴露 (3 分)	中暴露 (2 分)	低暴露 (1 分)
小	中暴露 (2 分)	低暴露 (1 分)	低暴露 (1 分)

7.3 定性健康风险表征

7.3.1 基本方法

基于化学物质健康危害性分级结果和暴露分级结果，按照下文公式计算得出健康风险级别。健康风险等级分为极高风险、高风险、中风险、低风险四个级别，健康风险级别划分规定见表 26。

$$RC_{health} = HAZARD_{health} \times EXPOSURE_{health} \quad (17)$$

式中： RC_{health} ——健康风险级别总分值，无量纲；

$HAZARD_{health}$ ——健康危害性分级赋分值，无量纲；

$EXPOSURE_{health}$ ——健康暴露分级赋分值，无量纲。

表. 26 健康风险级别划分

风险级别	健康风险级别分值
极高风险	16-12 分
高风险	11-8 分
中风险	7-4 分
低风险	3-1 分

7.3.2 定性健康风险表征结论

根据定性健康风险表征结果，给出化学物质属于健康极高风险、高风险、中风险和低风险的评估结论。

定性健康风险表征结果为健康中风险时，应评估风险控制措施的适当性。

定性健康风险表征结果为健康高风险时，应对风险控制措施进行评估，若风险无法降低，应增加风险控制措施或获取更多的危害性信息重新进行风险评估。

附录 A (资料性附录)

持久性、生物累积性和毒性 (PBT) 物质以及高持久性和高生物累积性 (vPvB) 化学物质风险评估方法

A. 1 PBT和vPvB类化学物质鉴别

A. 1. 1 鉴别标准

PBT 类化学物质是指同时具有持久性 (Persistent)、生物累积性 (Bioaccumulative) 和毒性 (Toxic) 的一类化学物质, vPvB 类化学物质是指同时具有高持久性 (very Persistent) 和高生物累积性 (very Bioaccumulative) 的化学物质。在开展 PBT 化学物质风险评估前, 应先按照 GB/T24782-2009 的鉴别指标和规定, 鉴别化学物质是否为 PBT 和 (vPvB) 化学物质。

A. 1. 2 鉴别方法

A. 1. 2. 1 持久性鉴别方法

A. 1. 2. 1. 1 数据评估

鉴别化学物质是否具有持久性 (P) 和高持久性 (vP), 首先应基于证据权重法回顾所有可用的筛选资料和非-试验资料 ((Q) SAR模型预测, 交叉参照和化学品分类), 然后判断其在哪些环境介质最易暴露, 最终通过实施相应的测试, 判断物质是否具有持久性。

快速生物降解性试验、固有生物降解性试验和模拟生物降解与转化试验 (地表水、沉积物或土壤) 等均可用于鉴别物质的持久性。快速生物降解性和固有生物降解性试验在筛选水平提供信息, 而模拟测试可以通过评价降解动力学、半衰期、有关矿化和降解产物 (代谢产物, 结合残留) 的信息而最终确认物质是否具有持久性。为选择适当的测试类型, 应考虑化学物质的理化性质和环境行为特征。

A. 1. 2. 1. 2 持久性鉴别的技术方案

在开展持久性鉴别时, 根据已有的信息, 可采用分层鉴别的技术方法, 并通过模拟测试方法的使用, 最终确认物质的持久性。详细的鉴别技术流程见图 A.1。

持久性鉴别流程中涉及的主要数据说明如下:

1) 快速生物降解证据: 如果该物质易于生物降解, 或者如果除了 10 天窗口外, 符合快速生物降解的标准, 则不需要进行进一步的生物降解试验, 可直接判定该物质不符合持久性 (P) 鉴别标准。

2) 水解的证据: 如果重要的和大量的非生物降解已得到确认, 水解转化产品已经进行了评价并得出结论不具有 PBT/vPvBs 性质, 则不需要进行进一步的降解试验。水解试验得到的半衰期必须与鉴别标准急性比较。同时应仔细评估水解形成的稳定降解产物。至少应设法鉴定浓度大于母体物质 10 % 的降解产物。

3) 表明该物质非持久性的其他证据: 如果该物质已经确认不以快速生物降解方式降解, 而是以其他生物降解筛选检测方式降解, 结果可表明该物质在环境中没有持久性。此类试验包括: 增强型易生物降解测试以及海洋生物降解性测试 (OECD TG 306, 海洋二氧化碳转化试验, 海洋BODIS测试和海洋二氧化碳顶空试验)。

4) 固有生物降解试验证据: 固有生物降解性试验主要指 Zahn- Wellens 测试 (如 HJ/T153 附录 A 302B) 或 MITI II 测试 (HJ/T153 附录 A302C), 其结果可用来判别物质是否符合 P 标准。在 Zahn-Wellens 测试中, 在 7 天内必须达到 70% 矿化水平 (DOC 去除), 对数生长期应不超过 3 天, 测试之前, 降解去除率的百分比应低于 15 % (不允许预适应接种)。在 MITI II 测试中, 在 14 天内必须达到 70% 矿化 (氧摄取), 对数生长期应不超过 3 天 (不允许预适应接种)。如果现有的试验结果显示, 物质在上述条件下不具有固有的生物降解性, 就明确表明该物质不会在环境中降解, 因此, 应判别为持久性物质。

6) 其他非生物降解：主要指光降解，氧化作用，削减作用的数据，此类数据本身不能直接用于持久性的评价，但是这类数据可为持久性的其他证据增加权重。

7) 纯培养数据的使用：如果数据来自纯培养的研究，就其自身而言不能直接用于持久性的评价，但是这类数据可为持久性的其他数据增加权重。

A. 1. 2. 2 生物累积性鉴别方法

A. 1. 2. 2. 1 数据评估

鉴别化学物质是否具有生物累积性 (B) 和高生物累积性 (vB)，应充分考虑所有可用的有关资料，包括测试数据和非测试数据。

1) 测试数据的使用

测试数据主要指水生生物的生物富集 (BCF) 试验数据，现场数据和生物大数据。采用标准试验方法 (如 HJ/T153 附录 A 305 流水式鱼类试验) 获得的试验数据，可直接用于鉴别物质是否具有生物累积性 (B) 和高生物累积性 (vB)。如果可以从其他生物富集试验中得到可靠数据，这类研究结果也可以使用。从监测数据计算出的生物累积因子 (BCF)、实地测量、生物放大因子 (BMFs) 或营养放大因子 (TMFs)，都可为鉴别化学物质是否具有生物累积性提供补充资料。此外，其他生物测试数据，如海底和陆地无脊椎动物物种生物累积研究，哺乳动物慢性毒性研究，哺乳动物毒性动力学研究等数据可以作为生物累积性鉴别的简单筛选工具或辅助信息。

2) 非生物测试数据的使用

非生物测试数据主要是指几种类型的物理化学数据，这些数据可作为物质生物累积性或高生物累积性鉴别的筛选信息使用。包括分子大小 (平均最大直径 $D_{max\ aver}$ 和最大分子长度 MMW)、分子量、辛醇水分配系数 (lgK_{ow}) 和辛醇溶解度。

此外其他非测试方法，如体外培养或仿生提取试验方法等也可以作为生物累积性鉴别的辅助信息使用。

A. 1. 2. 2. 1 生物累积性鉴别的技术方案

在开展生物累积性鉴别时，应收集所有可用的信息，可通过分层鉴别的技术方法，包括生物累积性测试方法的使用，最终评判物质的生物累积性。详细的鉴别技术流程见图 A.2。

A. 1. 2. 3 毒性鉴别方法

A. 1. 2. 3. 1 数据评估

鉴别化学物质是否具有毒性 (T)，应充分考虑所有可用的有关资料，包括测试数据和非测试数据。

1) 测试数据的使用

鉴别水生生物的毒性主要基于浮游生物的无可见效应浓度 (NOEC)，在评价 NOEC 时应首选鱼类、溞和藻类的标准化慢性试验。通常情况下，基于慢性数据鉴别毒性时，测试顺序首先是溞，然后是鱼类 (这里未提及藻类，因为慢性藻类数据 (即 72 小时 NOEC) 通常可以通过藻类的急性效应试验终点 (72 小时 EC₅₀) 获得)。如果通过慢性藻类或者溞类数据得出物质符合 T 标准，就不必进行慢性鱼类试验。

2) 非测试数据的使用

在评估的初级阶段，如果缺少急性或慢性毒性数据，可采用急性水生生物毒性的定量结构活性关系 (QSARs) 得出的数据，在筛选水平鉴别物质是否具有毒性。如果 QSARs 估计表明该物质满足 T 的筛选标准 (EC₅₀ 或 LC₅₀ 值 < 0.1 mg/L)，则应开展慢性试验。在开展鱼类慢性试验前，可考虑先开展鱼类急性毒性试验以检查其急性毒性值是否低 1 mg/L，或已有足够的证据证明符合毒性鉴别标准。

A. 1. 2. 3. 2 毒性鉴别的的技术方案

在开展毒性鉴别时，应收集所有可用的信息，可通过分层鉴别的技术方法，包括毒性测试方法的使用，最终评判物质的毒性。具体的评估流程为：

第 1 步：哺乳动物毒性慢性数据评价

如果物质被列为或有可能被列为致癌物质 (1 或 2 类)，致突变 (1 或 2 类) 或对生殖毒性 (1、2 或 3 类) 或有其他慢性毒性的证据 (如内分泌干扰性等)，则可以确定该物质是毒性物质并停止评价。

如果物质不是被列为致癌物质（1 或 2 类），致突变（1 或 2 类）或对生殖毒性（1、2 或 3 类）或有其他慢性毒性的证据如内分泌干扰性等，那么将进行第 2 步。

第 2 步：急性水生毒性数据的评价；

如果有任何 $EC_{50}/LC_{50} < 0.1 \text{ mg/L}$ ，那么该物质是一种潜在的 T 候选物。那么将进行第 3 步。

第 3 步：审议 P 和 B 评估的结果

如果已经确认该物质是 P 和 B，然后着手进行第 4 步（慢性 T 测试）

如果已经确认该物质不是 P 或者也不是 B，然后结束。

第 4 步：慢性毒性测试。首先进行非脊椎动物物种慢性水生毒性试验，若有证据表明鱼类是最敏感的群体，则应开展鱼类慢性毒性试验。

如果 $NOEC < 0.01 \text{ mg/L}$ ，那么可以确认该物质是 PBT

如果 $NOEC \geq 0.01 \text{ mg/L}$ ，那么该物质不是毒性物质，并结束。

第 5 步：P 和 B 物质筛选

如果 $\log Kow \leq 4.5$ 或者符合其他不是 B 的标准，那么该物质不是 B 并停止评价。

如果物质是易于生物降解的，那么该物质不是 P，并停止评价。

如果 $\log Kow > 4.5$ 并且不容易生物降解，那么着手进行第 6 步。

第 6 步：长期毒性的进一步筛选

如果缺乏资料，那么移动到第 3 步（P&B 的确认）；如果有很强的证据证明物质不是毒性物质，然后停止。

关于化学物质毒性评估的详细技术流程图见图 A.3。

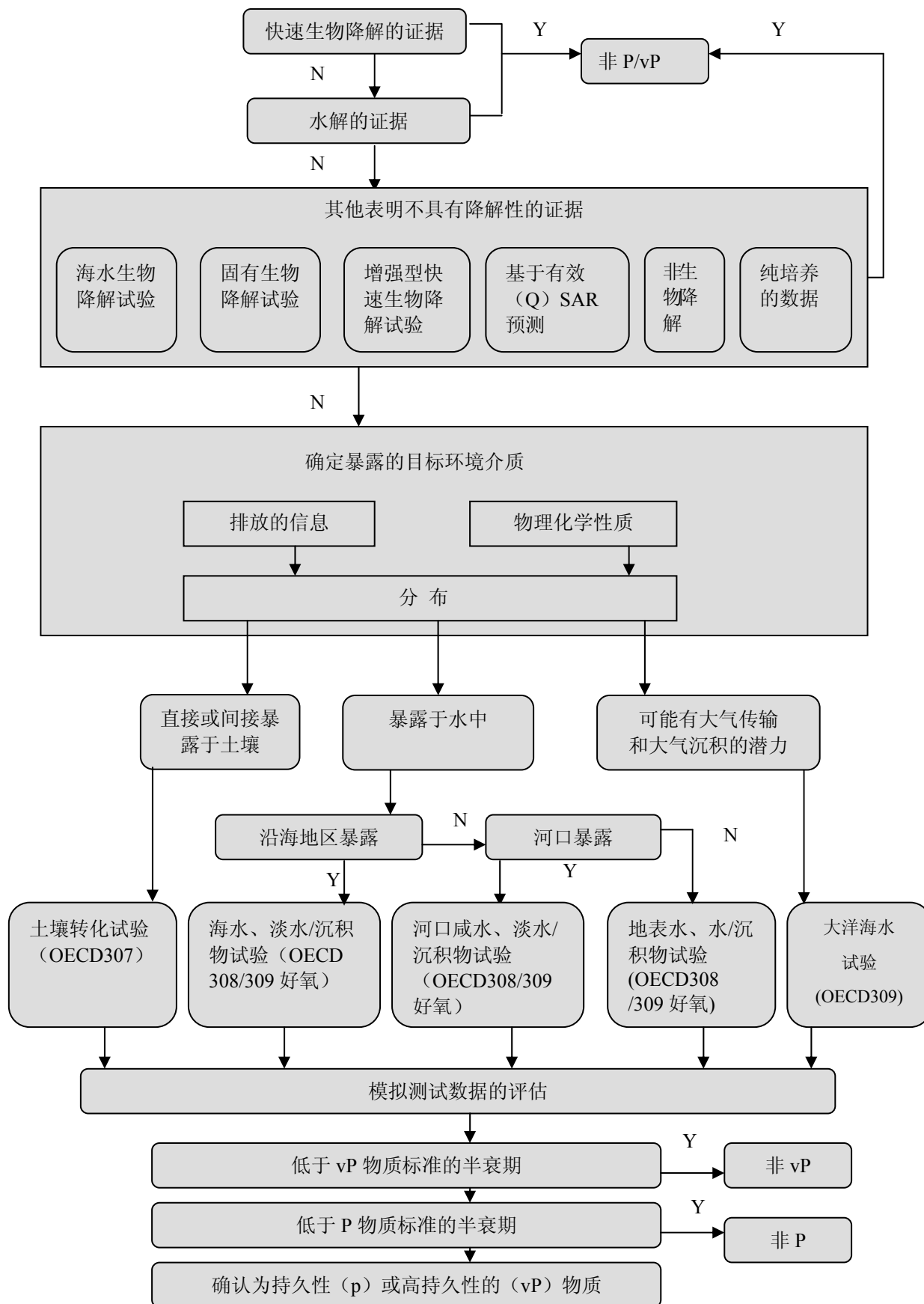


图 A.1 持久性 (P) 性鉴别技术方案

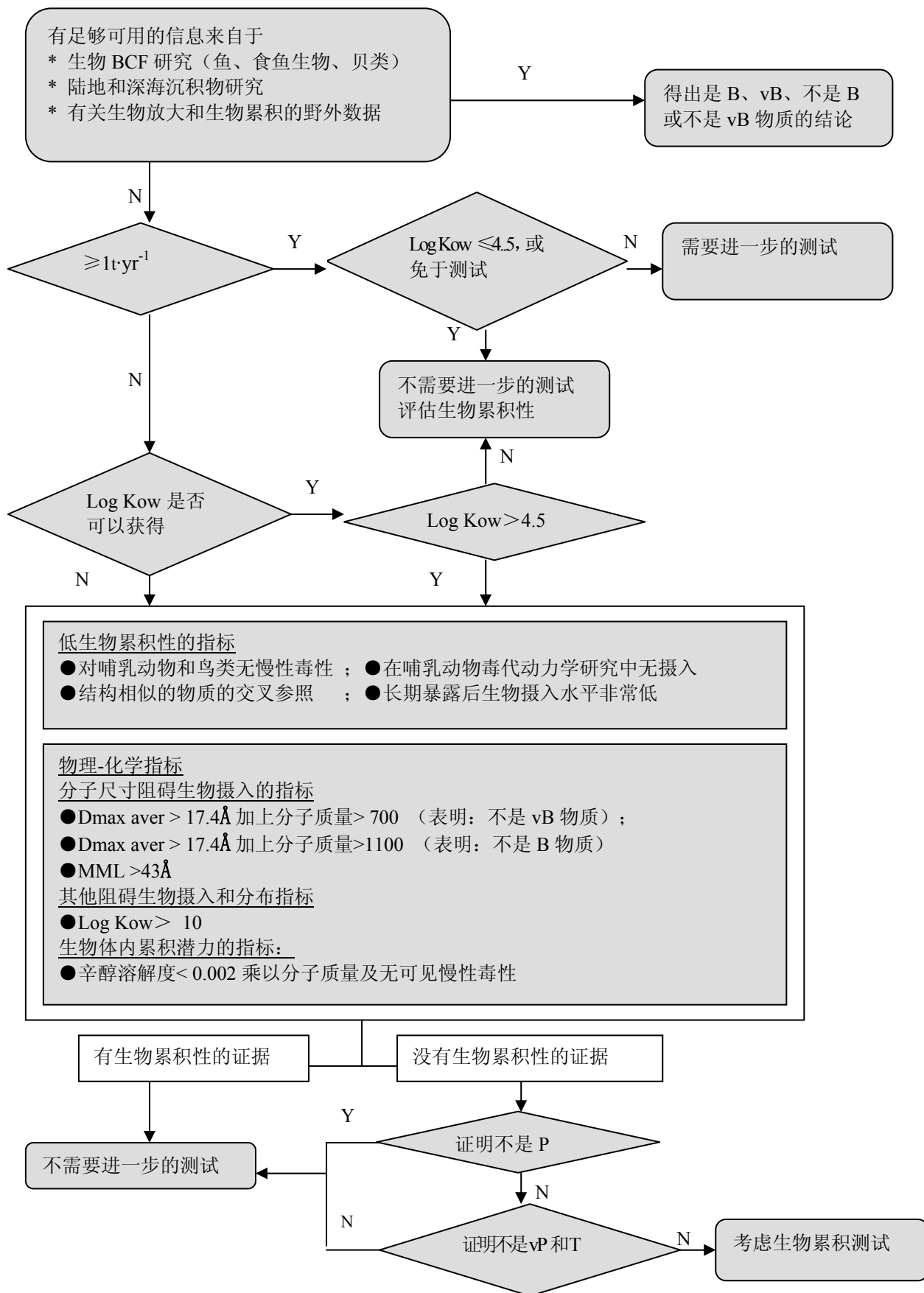


图 A.2 生物累积性（B）鉴别技术方案

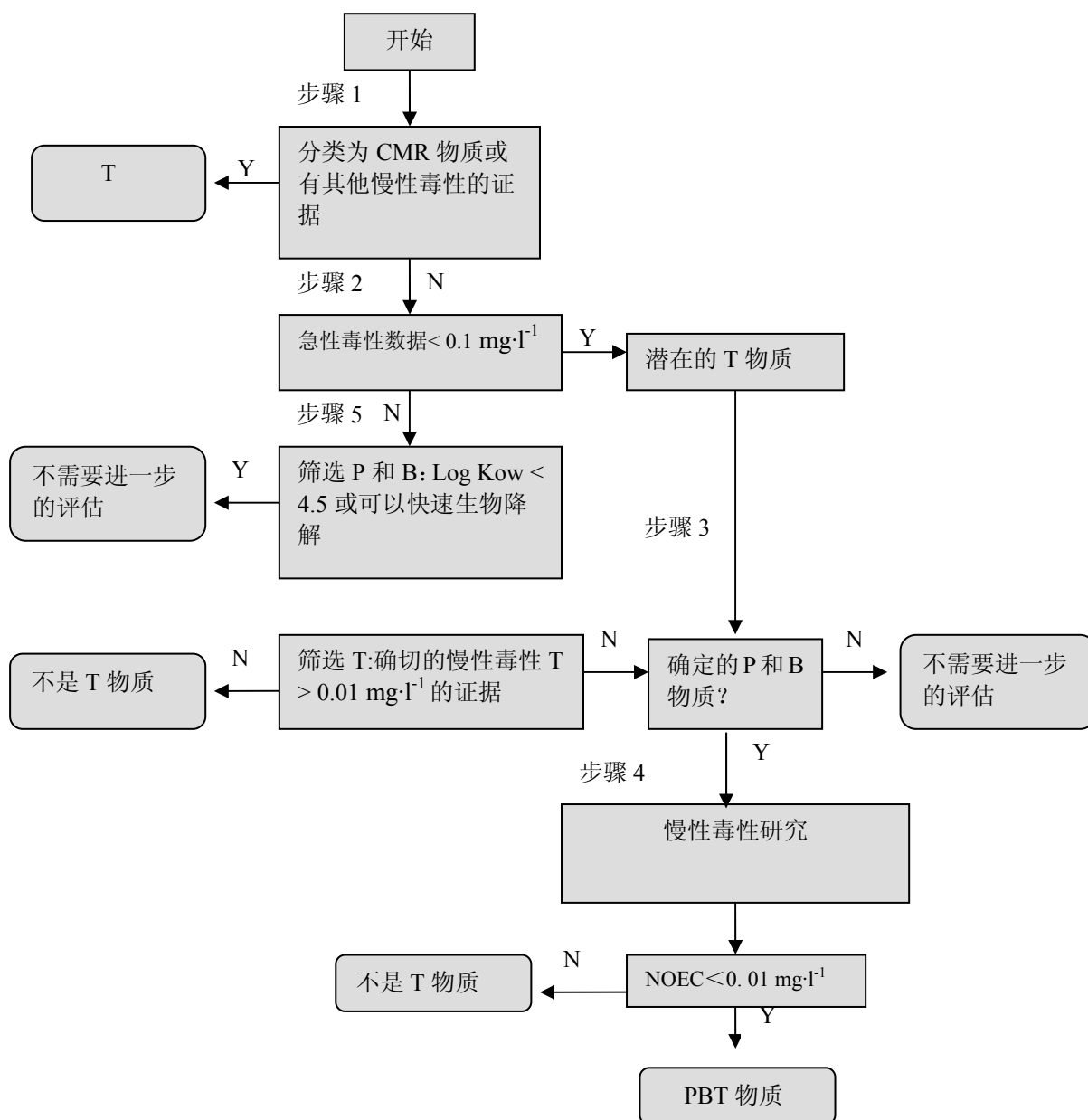


图 A.3 毒性 (T) 鉴别技术方案

A.2 PBT和vPvB类化学物质危害性表征

当通过危害性鉴别确定化学物质为PBT和vPvB类化学物质后,危害性表征可按照化学物质环境/健康危害性表征的通用要求开展。

A.3 PBT和vPvB类化学物质暴露评估

PBT化学物质的暴露评估包括建立暴露场景和进行排放估计两部分工作。在建立暴露场景过程中,通用暴露场景和假设不适用于PBT/vPvB物质的暴露评估,对于PBT/vPvB物质的暴露评估需要获取物质详细的暴露数据以建立专门的暴露场景。在建立暴露场景过程中,用途描述和相关的风险管理措施应特别具体。在进行排放估计时,应估计化学物质在所有确定的使用期间释放到不同环境介质中的数量,包括物质加工制造或确定的使用期间所有活动释放到不同环境空间的释放率估计。排放量可以通过质量平衡进行计算。

A. 4 PBT和vPvB物质的风险表征和风险控制措施

PBTs 或 vPvBs 的风险表征最终目的不在于风险商的简单计算，而是要求采用适当的风险控制措施使 PBT 化学物质的排放量和由 PBT 物质带来的暴露最小化。PBT/vPvB 物质的风险表征包括环境风险，不同人群的风险（工人、消费者的暴露或间接地通过环境的暴露），由化学物质的物理化学性质引起的风险表征。

使排放和暴露最小化的风险控制措施包括物质的严格控制，程序和控制技术的应用，和由受过训练的人员处理化学物质等。

附录 B
(资料性附录)
化学物质风险评估模型公式参数计算方法

B.1 化学物质在环境中的归趋

B.1.1 固-水分配

化学物质在环境介质中(土壤、沉积物、悬浮物质)的固-水分配系数($K_{p_{comp}}$),采用公式(B.1)计算,

$$K_{p_{comp}} = Foc_{comp} \cdot Koc \quad \text{其中 } comp \in \{soil, sed, susp\} \quad (B.1)$$

式中: $K_{p_{comp}}$ ——化学物质在各种环境介质中(土壤、沉积物、悬浮物质)的固-水分配系数, $l \cdot kg^{-1}$;

Foc_{comp} ——环境介质(土壤、沉积物、悬浮物质)中有机碳的质量分数, $kg \cdot kg^{-1}$;

Koc ——有机碳-水分配系数, $l \cdot kg^{-1}$ 。 Koc 通过试验测得,若无实测值,采用公式(B.2)计算,

$$Koc = 0.411Kow \quad (B.2)$$

式中: Koc ——有机碳-水分配系数, $l \cdot kg^{-1}$;

Kow ——正辛醇水分配系数, $l \cdot kg^{-1}$ 。

B.1.2 气-水分配

1) 亨利常数

亨利常数(HENRY)采用公式(B.3)计算,

$$HENRY = \frac{VP \cdot MOLW}{SOL} \quad (B.3)$$

式中: HENRY——亨利常数, $Pa \cdot m^3 \cdot mol^{-1}$;

MOLW——分子量, $g \cdot mol^{-1}$;

SOL——水溶解度, $mg \cdot l^{-1}$;

VP——蒸汽压, Pa, (计算时,蒸汽压与水溶解度应为相同温度下的测定值)。

2)气-水分配系数

化学物质在空气介质和水介质间的分配系数($K_{air-water}$)采用公式(B.4)计算,

$$K_{air-water} = \frac{HENRY}{R \cdot TEMP} \quad (B.4)$$

式中: $K_{air-water}$ ——化学物质的气-水分配系数, 无量纲;

R——气体常数, $Pa \cdot m^3 \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$;

TEMP——水气界面的温度(与计算过冷液蒸汽压时,环境温度的取值相同), K;

HENRY——亨利常数, $Pa \cdot m^3 \cdot mol^{-1}$, 计算方法见公式(B.3)。

B.1.3 环境介质—水分配

化学物质在环境介质(土壤、沉积物、悬浮物质)和水介质间的分配系数,采用公式(B.5)计算:

$$K_{comp-water} = Fair_{comp} \cdot K_{air-water} + Fwater_{comp} + Fsolid_{comp} \cdot \frac{Kp_{comp}}{1000} \cdot RHOsolid \quad (B.5)$$

其中 $comp \in \{soil, sed, susp\}$

式中: $K_{comp-water}$ ——环境介质(土壤、沉积物、悬浮物质)-水分配系数, $m^3 \cdot m^{-3}$;

$K_{air-water}$ ——气-水分配系数，无量纲，计算方法见公式(B.4);
 $K_{p_{comp}}$ ——化学物质在各种环境介质中（土壤、沉积物、悬浮物质）中的固-水分配系数， $l \cdot kg^{-1}$ ，计算方法见公式(B.1);
 $F_{water_{comp}}$ ——环境介质（土壤、沉积物、悬浮物质）中水的比例， $m^3 \cdot m^{-3}$;
 $F_{solid_{comp}}$ ——环境介质（土壤、沉积物、悬浮物质）中固体的比例， $m^3 \cdot m^{-3}$;
 $F_{air_{comp}}$ ——环境介质（土壤、沉积物、悬浮物质）中气的比例(仅与土壤相关), $m^3 \cdot m^{-3}$;
 RHO_{solid} ——固相的密度， $kg \cdot m^{-3}$ 。

B. 1. 4 气体-气溶胶分配

大气环境中化学物质吸附于气溶胶颗粒的比例（ $F_{ass_{aer}}$ ）采用公式（B.6）计算，

$$F_{ass_{aer}} = \frac{CONjunge \cdot SURF_{aer}}{VP + CONjunge \cdot SURF_{aer}} \quad (B.6)$$

式中： $F_{ass_{aer}}$ ——大气环境中化学物质吸附于气溶胶颗粒的比例，无量纲；
 $CONjunge$ ——Junge 方程常数， $Pa \cdot m$ ；
 $SURF_{aer}$ ——气溶胶颗粒的表面积， $m^2 \cdot m^{-3}$ ； $CONjunge$ 和 $SURF_{aer}$ 的乘积默认为 $10^{-4} Pa$ ；
 VP ——蒸汽压， Pa ，对于固体，需要将蒸汽压修正为过冷液蒸汽压(VPL)进行公式计算。

过冷液蒸汽压计算方法见公式(B.7)。

$$VPL = \frac{VP}{e^{6.79} \cdot (1 - \frac{TEMP_{melt}}{TEMP})} \quad (B.7)$$

式中： VPL ——过冷液体蒸汽压， Pa ；
 $TEMP$ ——环境温度， K ；
 $TEMP_{melt}$ ——熔点， K ；
 VP ——蒸汽压， Pa 。

B. 1. 5 土壤降解速率常数

土壤降解速率常数，可以通过土壤降解半衰期 $DT50$ 转化而来，计算方法见如下公式

$$k_{bio_{soil}} = \frac{\ln 2}{DT50_{bio_{soil}}} \quad (B.8)$$

式中： $k_{bio_{soil}}$ ——土壤中化学物质生物降解的一级反应速率常数， d^{-1} ；
 $DT50_{bio_{soil}}$ ——土壤中化学物质生物降解半衰期， d ，推荐值见表 B.1。

表 B. 1 基于标准生物降解试验结果的土壤降解半衰期

$K_{p_{soil}} (l \cdot kg^{-1})$	$DT50_{bio_{soil}}(d)$		
	快速生物降解	快速生物降解，但不满足“10天观察期”要求	可固有生物降解
≤ 100	30	90	300
$>100, \leq 1000$	300	900	3000
$>1000, \leq 10000$	3000	9000	30000

B. 2 化学物质的环境排放

B. 2. 1 工作内容

化学物质的环境排放估计，是对化学物质生命周期各阶段排放进入局部环境中数量的定量描述，主要考虑化学物质生命周期中的不同使用类型、不同排放途径以及接纳环境系统和

排放的空间尺度。化学物质在生命周期中进入环境的排放量（包括无意和有意排放）可以采用实测法、物料衡算法或模型公式法计算。

B. 2. 2 实测法计算化学物质的环境排放量

实测法是通过实际测量化学物质生命周期过程中通过（废）水、（废）气或固体（废弃物）形式排放进入环境（水、气、土壤）的浓度、以及（废）水、（废）气或固体（废弃物）的排放量，计算环境化学物质环境排放量的方法。现有化学物质可采用实测法计算环境排放量。

B. 2. 3 物料衡算法计算化学物质的环境排放量

物料衡算法是指根据物质质量守恒原理，对工艺过程中使用的物料变化情况进行定量分析的一种方法。即：投入物料量总和=产出物料量总和。

采用物料衡算法核算化学物质排放量时，应建立在对暴露场景充分了解和分析的基础上，从物料平衡分析着手，对企业的原材料、辅料、能源、水的消耗量、生产工艺过程进行综合分析，使测算出的化学物质排放量能够比较真实地反映企业在工艺过程中的实际情况。

B. 2. 4 模型公式法计算化学物质的环境排放量

B. 2. 4. 1 信息要求

采用模型公式进行环境排放估计时，需要以下信息的支持：

- (1) 化学物质的申报数量。
- (2) 生命周期阶段：如生产、配制、物质或配制品的工业/专业/消费者使用等；
- (3) 在生命周期阶段中的使用类型：如：封闭系统使用、开放系统使用、全分散室内使用、全分散室外使用、作为基体表面或内部的包含物使用、中间体的工业使用、加工助剂的工业使用、反应加工助剂的工业使用，等等。
- (4) 产品数量在市场中的分布数量，如：制造商对物质的年生产量，或者进口商对物质的年进口量，在下游用户市场中的分布情况。
- (5) 排放方式：时间和空间的分布。
- (6) 排放路径：化学物质排放的目标环境介质，如可排放进入过空气、土壤、水体等，因此可以对每一种环境目标介质，针对每一个相关生命周期阶段进行排放估计。
- (7) 排放源：应考虑可能同时由多个源头发生的排放。
- (8) 排放因子：指在线或离线减排风险控制措施之前，排入（废）水、（废）气、土壤或者（固体）废物中的化学物质的量在使用量中所占的比例。
- (9) 减排的风险控制措施：任何减少对空气、水体、土壤或者（固体）废物排放量的减排或控制技术。

B. 2. 4. 2 模型公式计算方法

单一点源的局部环境排放量，可以采用公式（B.9）进行计算。

$$E_{local,i,j,u} = \frac{Q_{chemical} \cdot F_{emission} \cdot (1 - F_{abatement})}{T_{emission}} \quad (B.9)$$

- (i: 环境介质（水体、空气、土壤）；j: 生命周期阶段；u: 某一具体用途）
式中： $E_{local,i,j,u}$ ——在生命周期阶段j，用途u对环境分系统i的局部点源日排放量估计值， $kg \cdot d^{-1}$ ；
 $Q_{chemical}$ ——每年用于某一用途或者某一过程的化学物质的量， $kg \cdot yr^{-1}$ ；
 $F_{emission}$ ——排放因子，无量纲；
 $F_{abatement}$ ——减排的风险控制措施的效率；无量纲；
 $T_{emission}$ ——排放持续的时间（例如每年的工作日）， $d \cdot yr^{-1}$ 。

B. 3 化学物质经由污水处理厂的环境排放

B. 3.1 化学物质经由污水处理厂的环境归趋

排放进入污水处理厂的化学物质，经过物理、化学以及生化过程，使其中一部分被降解后，其余部分排放进入空气、地表水及污泥中。采用国际上通用的标准污水处理厂模型（如：SimpleTreat 或类似模型），可以获取化学物质经由污水处理厂进入环境（水、气、污泥）的比例（ F_{stp_water} 、 F_{stp_air} 、 F_{stp_sludge} ），继而估算化学物质经过污水处理厂的环境排放。

B. 3.2 污水处理厂向大气环境间接排放

化学物质经由污水处理厂处理后，向大气环境间接排放化学物质的量，采用公式 (B.10) 计算：

$$Estp_{air} = F_{stp_{air}} \cdot Elocal_{water} \quad (B.10)$$

式中： $Estp_{air}$ ——污水处理厂向大气环境间接排放化学物质的日排放量， $kg \cdot d^{-1}$

$F_{stp_{air}}$ ——污水处理厂中化学物质排入大气环境中的比例，无量纲，取值方法见 B.3.1；

$Elocal_{water}$ ——进入污水处理厂的废水中化学物质的日排放量， $kg \cdot d^{-1}$ ，计算方法见 B.2。

B. 3.3 污水处理厂污泥中化学物质浓度

化学物质经由污水处理厂处理后，干污泥中化学物质浓度，采用公式 (B.11) 计算：

$$C_{sludge} = \frac{F_{stp_{sludge}} \cdot Elocal_{water} \cdot 10^6}{SLUDGERATE} \quad (B.11)$$

式中： C_{sludge} ——干污泥中化学物质的浓度， $mg \cdot kg^{-1}$ ；

$Elocal_{water}$ ——进入污水处理厂的废水中化学物质的日排放量， $kg \cdot d^{-1}$ ，计算方法见 B.2；

$F_{stp_{sludge}}$ ——污水处理厂中化学物质排入污泥中的比例，无量纲，取值方法见 B.3.1；

$SLUDGERATE$ ——污泥产生量， $kg \cdot d^{-1}$ ，计算方法见公式 (B.12)。

污泥产生速率，可由初沉池和二沉池中污泥流量估计，采用公式 (B.12) 计算，

$$SLUDGERATE = \frac{2}{3} \cdot SUSPCONC_{inf} \cdot EFFLUENT_{stp} + SURPLUS_{sludge} \cdot CAPACITY_{stp} \quad (B.12)$$

式中： $SLUDGERATE$ ——污泥产生量， $kg \cdot d^{-1}$ ；

$SUSPCONC_{inf}$ ——污水处理厂进水中悬浮物质浓度， $kg \cdot m^{-3}$ ；

$EFFLUENT_{stp}$ ——污水处理厂出水量， $m^3 \cdot d^{-1}$ ；

$SURPLUS_{sludge}$ ——每人口当量的剩余污泥， $kg \cdot d^{-1} \cdot eq^{-1}$ ；

$CAPACITY_{stp}$ ——污水处理厂用人口当量表征的处理能力， eq 。

B. 4 化学物质的大气沉降通量

B. 4.1 化学物质大气沉降通量的计算

化学物质大气沉降通量（ DEP_{total} ），采用公式 (B.13, B.14) 计算：

$$DEP_{total} = (Elocal_{air} + Estp_{air}) \cdot (F_{ass_{aer}} \cdot DEP_{std_{aer}} + (1 - F_{ass_{aer}}) \cdot DEP_{std_{gas}}) \quad (B.13)$$

$$DEP_{total_{ann}} = DEP_{total} \cdot \frac{T_{emission}}{365} \quad (B.14)$$

式中： DEP_{total} ——化学物质大气沉降通量， $mg \cdot m^{-2} \cdot d^{-1}$ ；

$DEP_{total_{ann}}$ ——化学物质大气年平均沉降通量， $mg \cdot m^{-2} \cdot d^{-1}$ ；

$Elocal_{air}$ ——点源向局部大气环境直接排放化学物质的日排放量， $kg \cdot d^{-1}$ ，计算方法见公式 (B.2)；

$Estp_{air}$ ——污水处理厂向大气环境间接排放化学物质的日排放量， $kg \cdot d^{-1}$ ，计算方法见公式 (B.10)；

$F_{ass_{aer}}$ ——大气环境中化学物质吸附于气溶胶颗粒的比例，无量纲；计算方法见公式(B.6)；

$DEP_{std_{aer}}$ ——源强为 $1 \text{ kg}\cdot\text{d}^{-1}$ 时，气溶胶中化学物质标准沉降通量， $\text{mg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{d}^{-1}$ ；

$DEP_{std_{gas}}$ ——源强为 $1 \text{ kg}\cdot\text{d}^{-1}$ 时，气体中化学物质的标准沉降通量， $\text{mg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{d}^{-1}$ ；

$T_{emission}$ ——年排放天数， $\text{d}\cdot\text{yr}^{-1}$ ；

B.4.2 土壤中化学物质大气沉降通量的计算

每千克土壤中化学物质大气沉降通量 (D_{air})，采用公式(B.15)计算：

$$D_{air} = \frac{DEP_{total_{ann}}}{DEPTH_{soil} \cdot RHO_{soil}}$$

(B.15)

式中： D_{air} ——每千克土壤中化学物质大气沉降通量， $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$ ；

$DEP_{total_{ann}}$ ——化学物质大气年平均沉降通量， $\text{mg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{d}^{-1}$ ，计算方法见公式(B.14)；

$DEPTH_{soil}$ ——土壤混合深度，m；

RHO_{soil} ——土壤容重， $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ 。

B.5 土壤中化学物质的去除

B.5.1 土壤中化学物质去除的一级反应速率常数计算

土壤中化学物质去除主要考虑化学物质在土壤中的挥发、淋溶和生物降解过程。

去除一级反应速率常数采用公式(B.16)计算：

$$k = k_{volat} + k_{leach} + k_{bio_{soil}} \quad (\text{B.16})$$

式中： k ——土壤中化学物质去除的一级反应速率常数， 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(B.17)；

k_{leach} ——顶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(B.18)；

$k_{bio_{soil}}$ ——土壤中化学物质生物降解的准一级反应速率常数， d^{-1} ；计算方法见公式(B.8)。

B.5.2 土壤中化学物质挥发的准一级反应速率常数计算

土壤中化学物质挥发的准一级反应速率常数 (k_{volat}) 采用公式(B.17)计算：

$$\frac{1}{k_{volat}} = \left(\frac{1}{kasl_{air} \cdot K_{air-water}} + \frac{1}{kasl_{soilair} \cdot K_{air-water} + kasl_{soilwater}} \right) \cdot K_{soil-water} \cdot DEPTH_{soil} \quad (\text{B.17})$$

式中： k_{volat} ——土壤中化学物质挥发的准一级反应速率常数， d^{-1} ；

$kasl_{air}$ ——空气-土壤界面气相传质系数， $\text{m}\cdot\text{d}^{-1}$ ；

$kasl_{soilair}$ ——空气-土壤界面土壤空气侧传质系数， $\text{m}\cdot\text{d}^{-1}$ ；

$kasl_{soilwater}$ ——空气-土壤界面土壤水侧传质系数， $\text{m}\cdot\text{d}^{-1}$ ；

$K_{air-water}$ ——气-水分配系数， $\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$ ，计算方法见公式(B.4)；

$K_{soil-water}$ ——土壤-水分配系数， $\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$ ，计算方法见公式(B.5)；

$DEPTH_{soil}$ ——土壤的混合深度，m。

B.5.3 顶层土壤化学物质淋溶的准一级反应速率常数计算

顶层土壤化学物质淋溶的准一级反应速率常数 (k_{leach}) 采用公式(B.18)计算：

$$k_{leach} = \frac{F_{inf_{soil}} \cdot RAIN_{rate}}{K_{soil-water} \cdot DEPTH_{soil}} \quad (\text{B.18})$$

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} ；

$F_{inf_{soil}}$ ——渗透进入土壤的雨水比例，无量纲；

$RAIN_{rate}$ ——湿沉降速率， $\text{m}\cdot\text{d}^{-1}$ ；

$K_{soil-water}$ ——土壤-水分配系数， $\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$ ，计算方法见公式(B.5)；

DEPTH_{soil}——土壤的混合深度，m。

B. 6 土壤中化学物质浓度的计算

B. 6.1 施用污泥及大气沉降持续 10 年后 0 时刻土壤中化学物质浓度的计算

污泥施用及大气持续沉降 10 年后 0 时刻，土壤中化学物质的浓度 (C_{soil10}(0))，采用公式 (B.19) 计算：

$$C_{soil10}(0) = Cdep_{soil10}(0) + Csludge_{soil10}(0) \quad (B.19)$$

式中：C_{soil10}(0) ——污泥施用及大气沉降持续 10 年后 0 时刻，土壤中化学物质浓度，mg·kg⁻¹；

Cdep_{soil10}(0) ——大气沉降持续 10 年后 0 时刻，土壤中化学物质的浓度，mg·kg⁻¹；
计算公式见(B.20)

Csludge_{soil10}(0) ——污泥施用 10 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.23)。

B. 6.2 大气沉降对土壤化学物质浓度的贡献

大气沉降持续 10 年后 0 时刻，土壤中化学物质的浓度，采用公式 (B.20) 计算：

$$Cdep_{soil10}(0) = \frac{D_{air}}{k} - \frac{D_{air}}{k} \cdot e^{-365 \cdot 10 \cdot k} \quad (B.20)$$

式中：Cdep_{soil10}(0) ——大气沉降持续 10 年后 0 时刻，土壤中化学物质的浓度，mg·kg⁻¹；

D_{air}——每千克土壤的大气沉降通量，mg·kg⁻¹·d⁻¹，计算方法见公式 (B.15)；

k——化学物质从土壤中消除的总速率常数，d⁻¹，计算方法见公式 (B.16)。

B. 6.3 污泥施用对土壤化学物质浓度的贡献

B. 6.3.1 第 1 年污泥施用对土壤化学物质浓度的贡献

污泥施用 1 年后 0 时刻，土壤中化学物质的浓度，采用公式 (B.21) 计算，

$$Csludge_{soil1}(0) = \frac{C_{sludge} \cdot APPL_{sludge}}{DEPTH_{soil} \cdot RHO_{soil}} \quad (B.21)$$

式中：Csludge_{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}——干污泥中化学物质浓度，mg·kg⁻¹，计算方法见公式 (B.11)；

APPL_{sludge}——干污泥的年使用率，kg·m⁻²·yr⁻¹；

DEPTH_{soil}——土壤的混合深度，m；

RHO_{soil}——土壤容重，kg·m⁻³。

年末仍然留在顶层土壤中的化学物质比例，采用公式 (B.22) 计算：

$$Facc = e^{-365k} \quad (B.22)$$

式中：Facc——一年内化学物质在土壤中累积的比例，无量纲；

k——土壤中化学物质去除的一级反应速率常数，d⁻¹，计算方法见公式 (B.16)。

B. 6.3.2 10 年污泥施用对土壤化学物质浓度的贡献

污泥施用 10 年后 0 时刻，土壤中化学物质的浓度，采用公式 (B.23) 计算：

$$Csludge_{soil10}(0) = Csludge_{soil1}(0) \cdot [1 + \sum_{n=1}^{9} Facc^n] \quad (B.23)$$

式中：Csludge_{soil10}(0) ——污泥施用 10 年后 0 时刻，土壤中化学物质的浓度，mg·kg⁻¹；

$C_{\text{sludge}_{\text{soil}}(0)}$ ——污泥施用 1 年后 0 时刻，土壤中化学物质的浓度， $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ ，计算公式见 (B.21)；

F_{acc} ——一年内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)。

附录 C
(资料性附录)
定性不确定性分析

C.1 不确定性来源的识别与分类

C.1.1 不确定性来源的系统性识别

在危害评估和暴露评估阶段可以对各种不确定性进行单独分析，整体的不确定性分析在风险表征阶段进行。

C.1.2 不确定性来源分类

各种不确定性来源可分为三组，分别是场景、模型和输入参数。

1) 场景不确定性

场景不确定性是指通过对物质使用的描述，建立暴露场景过程中产生的不确定性。这种不确定性主要与该场景描述的准确程度有关。

场景不确定性包括描述性的误差（如错误的或不完整的信息）、数据集的误差（如数量和时间的近似估计）、评估的误差（如选错了模型）和不完全分析的误差（如忽略了一个重要的暴露途径）。

2) 模型不确定性

模型不确定性是指在风险评估过程中是否选择了适宜的模型而带来的不确定性。风险评估中，通常采用数学模型和统计模型来表达某一个暴露过程或危险过程。

模型不确定性主要基于外推法（即在某一模型的开发领域之外使用该模型）、建模误差（即模型本身的结构没有考虑到某些参数、对充分混合阶段的假设等）和依存度误差（即参数之间的相关性欠缺考虑）。

3) 参数不确定性

参数不确定性是指参数定值过程所带来的不确定性。风险评估涉及到参数的定值，无论该参数是为了直接用于测定暴露量，还是为了作为模型的输入数据而使用。由于缺乏数据或数据不足，这些数值的不确定性非常普遍。

C.2 不确定性来源分析

C.2.1 不确定性来源清单

使用清单可以对潜在的不确定性来源进行系统性识别。表 C.1 和表 C.2 列出了大多数情况下各种主要不确定性来源的粗略清单。根据所考虑的风险类型（如环境、职业、消费者）、暴露类别和所考虑的影响类别（如 PBT 评估），还可以制定更加具体详细的清单。

表 C.1 危害性评估的主要不确定性来源

不确定性分组	不确定性来源
模型不确定性	模型适当性，如效应评估中所采用的 QSAR，毒代动力学和机理模型： <ul style="list-style-type: none"> - 过于简化； - 依赖性错误； - 在有效域范围之外使用。
参数不确定性（物理化学和危害特性）	测量不确定性，例如： <ul style="list-style-type: none"> - 样本小； - 测量错误； 数据选择，如： <ul style="list-style-type: none"> - 剂量描述符号的选择； - 默认值的选择
	外推方法的不确定性，如： <ul style="list-style-type: none"> - QSAR - 交叉参照 - 体外试验
	与不确定性有关的外推系数适当性，如：

	<ul style="list-style-type: none"> - 种间； - 急性到慢性； - 实验室到野外等。
--	---

表 C.2 暴露评估的主要不确定性来源

不确定性分组	不确定性来源
场景不确定性	暴露场景假设的适当性，如： <ul style="list-style-type: none"> - 排放来源（即制造/使用过程或生命周期中未考虑某些相关排放源） - 空间和时间设置（如局部、区域、短期或长期）； - 暴露途径/路线（如未考虑重要的暴露途径/路线）； - 暴露事件（如发生相关事件的量级和频率）； - 风险管理措施的假设效果（如使用）。
模型不确定性	所使用模型的适当性，如： <ul style="list-style-type: none"> - 过于简化； - 依赖性错误； - 在有效域范围外应用。
参数和数据不确定性	测量不确定性，如： <ul style="list-style-type: none"> - 样本小； - 测量错误。
	数据选择，如： <ul style="list-style-type: none"> - 排放估计过于保守； - 暴露评估中暴露浓度的选择； - 默认值的适当性； - 风险管理措施的假设有效性。
	外推，如： <ul style="list-style-type: none"> - 对相似物质/场景进行交叉参照。
	差异性，如： <ul style="list-style-type: none"> - 环境差异性（温度、风、同源性等）； - 行为差异性； - 与上述任意方面相关的时间和空间变化造成的差异。

C.2.2 不确定性来源清单说明

C.2.2.1 危害性评估不确定性来源清单说明

在危害性评估中，不确定性来源主要是对物理化学数据和危害性信息的估计。

1) 物理化学数据：根据(Q)SARs 或其他估计方法估计物质性质时，会导致不确定性；不确定性也可能由于试验数据的选择、所采用的试验方法或样本大小产生；如有必要，通过更精确的检测可大幅降低这些因素带来的不确定性。

2) 危害性信息：评估系数的适当性是危害性评估不确定性的主要来源，本标准中给出的评估系数一般无需进行修订，但应全面了解评估因子背后的保守性；在危害信息基于选择性试验方法的情况下，应考虑进行不确定性分析。

C.2.2.2 暴露评估不确定性来源清单说明

在暴露评估中，主要的不确定性可能存在于暴露场景中的各种假设和所使用的测量值中。在暴露评估中，一般认为主要的不确定性来源与物质的排放和暴露量估计，风险管理措施有效性，以及暴露途径/路线有关。具体内容如下：

1) 模型结构可能存在缺陷。建模过程中，有很大一部分不确定性不能按照严格的定量方式进行评估，一般只能对定性输入参数和模型逻辑结构的不确定性进行定性讨论。

2) 测量过程中可能产生不确定性。如在化学分析中不对全部的样本进行回收，可能会导致对暴露估计过低。一些测量结果可能会低于所使用方法的检测限制，因此，如果记录为零，会导致暴露估计过低；若采用检测限作为检测结果，则会导致暴露量评估过高。在读取实验室测量设备示数的过程中，以及其他一些实验室程序方面也可能产生不确定性（如样本制备方面）。遵守标准的采样协议规定和 GLP 实验室规范可以减少这些不确定性。

3) 采用小数据集估计暴露浓度时，应考虑统计采样的不确定性。大多数用于暴露

估计的测量数据都是小数据集，少于 12 个数据点很常见。观测次数越少，根据相关数据推导出相关数值的不确定性越大；

4) 获得的数据是否适合暴露评估，如数据集对暴露人口或自然社区是否具有代表性。

5) 获得数据集时选取测量方法的过程中会产生不确定性，特别是在风险评估过程之前或评估期间合并数据时。若对测量数据进行合并，应以透明方式进行。

6) 若没有特定场景的测量数据，可以通过专家评判根据类似数据外推。采用外推方法，会增大暴露估计中的不确定性；

7) 数据复杂时，实际测量与模型估测可配合使用。

C.3 定性不确定性表征

C.3.1 定性不确定性表征方法

定性不确定分析可从方向和量值两方面对每种不确定性来源进行表征。“方向”是指对不确定性评估结果的方向性影响，即对风险评估过高或过低的倾向。如：若不确定性来源暗示使用保守性假设，则会造成风险评估过高。“量值”是指不确定性来源可能对风险评估结果造成影响的程度。可以用简单的比例划分来表示量值，如低、中、高。在进行整体不确定性评估时，对每种不确定性来源的量值估计（如得分）进行简单的数学组合会产生错误，评估人员应能够识别各种不确定性来源的相关性。通过定性不确定性表征，应能辨别出关系最紧密的不确定性来源和减少不确定性来源的技术手段，并能评价不确定性来源对风险评估的整体影响。

C.3.2 定性的不确定性分析范例

表 C.3 给出了定性的不确定性分析范例，在该表格中把各种不确定性来源分成了三组：场景、模型和输入参数，每种不确定性来源又分为差异性或不确定性，然后进行方向和量级评价。“+”和“-”分别代表估计过高和估计过低，从“+”到“+++”和从“-”到“---”的比例表示量级由低到高。若不了解不确定性的方向，可用+/-表示。

表 C.3 定性的不确定性分析范例表

不确定性来源		不确定性/ 差异性	方向与 量值	
危害评估	模型	来源 1	VAR	-
	输入参数	来源 2	UNC	+++
		来源 n	UNC	++/-
		对危害估测的整体影响		
如：主要受来源 2 过高估计的影响，降低这种不确定性可通过……				
暴露量评估	情景	来源 1	UNC	++
	模型	来源 2	VAR	+
		来源 3	UNC	+/-
		输入参数	来源 4	UNC
	数	来源 M		--
对暴露估测的整体影响				
如：主要受来源 1 和来源 2 过高估计的影响，来源 1 可通过……降低。来源 2 的差异性数据概述了所采用的保守性假设只有在……情况下才是可行的。				
风险表征	对风险估测的整体影响			

如：在暴露评估假设基础上，风险估计似乎会被过高估计，可在深入调查基础上修改。

图例：+、++、+++ = 低度、中度和高度高估；-、--、--- = 低度、中度和高度低估；VAR=差异性；UNC=差异性。