



저작자표시-비영리-변경금지 2.0 대한민국

이용자는 아래의 조건을 따르는 경우에 한하여 자유롭게

- 이 저작물을 복제, 배포, 전송, 전시, 공연 및 방송할 수 있습니다.

다음과 같은 조건을 따라야 합니다:



저작자표시. 귀하는 원저작자를 표시하여야 합니다.



비영리. 귀하는 이 저작물을 영리 목적으로 이용할 수 없습니다.



변경금지. 귀하는 이 저작물을 개작, 변형 또는 가공할 수 없습니다.

- 귀하는, 이 저작물의 재이용이나 배포의 경우, 이 저작물에 적용된 이용허락조건을 명확하게 나타내어야 합니다.
- 저작권으로부터 별도의 허가를 받으면 이러한 조건들은 적용되지 않습니다.

저작권법에 따른 이용자의 권리는 위의 내용에 의하여 영향을 받지 않습니다.

이것은 [이용허락규약\(Legal Code\)](#)을 이해하기 쉽게 요약한 것입니다.

[Disclaimer](#)

工學博士 學位論文

다매체환경모델과 부분순서이론을 이용한 화학물질
위해성평가를 위한 관리우선순위 결정



2007年 2月

釜慶大學校 大學院

環 境 工 學 科

盧 京 準

工學博士 學位論文

다매체환경모델과 부분순서이론을 이용한 화학물질
위해성평가를 위한 관리우선순위 결정

指導教授 朴 淸 吉

이 論文을 工學博士 學位論文으로 提出함.

2007年 2月

釜慶大學校 大學院

環 境 工 學 科

盧 京 準

盧京準의 工學博士 學位論文을 認准함.

2006年 12月 日

主 審 工學博士 李 錫 謨



委 員 工學博士 李 濟 根



委 員 工學博士 李 柄 憲



委 員 工學博士 趙 顯 書



委 員 理學博士 朴 清 吉



목 차

Contents	i
List of Tables	iii
List of Figures	v
Abstract	vii
I. 서론	1
II. 재료 및 방법	7
1. 다매체환경모델의 개발	7
1.1 다매체환경모델의 개요	7
1.2 환경매체중 화학물질의 물질수지	12
1.3 환경매체간 화학물질의 분배평형	15
1.4 환경매체중 화학물질의 분해	18
1.5 환경매체에 의한 노출평가	21
1.6 위해성평가 지침치 설정	26
1.7 위해성평가	27
1.8 다매체환경모델과 입력자료 데이터베이스의 연계	29
2. 순위결정을 위한 부분순서이론	33
2.1 부분순서이론	33
2.2 Hasse 다이어그램	36
2.3 선형확장과 순위확률	38
III. 다매체환경모델의 적용성	39
1. 실측치와 비교평가 및 민감도 분석	39

1.1 모델입력자료 산정	40
1.2 환경매체중 화학물질 분포 및 실측치와 비교평가	54
1.3 민감도 분석	59
2. 인간의 1일섭취량	64
2.1 모델입력자료 산정	64
2.2 인간의 1일 섭취량 산정	69
IV. 화학물질 위해성평가를 위한 관리우선순위 결정	76
1. 다매체환경모델에 의한 노출가능성 평가	76
1.1 모델입력자료 산정	77
1.2 환경매체중 화학물질 농도예측	84
2. 노출가능성과 부분순서이론에 의한 관리우선순위 결정	104
V. 결론	113
참고문헌	115
감사의 글	123

List of Tables

Table 1. The structure of the MUSEM main modules	9
Table 2. Multimedia environmental models; The fugacity approach	11
Table 3. Rate constants and half-lives for biodegradation: extrapolation from the biodegradation screening tests (day)	19
Table 4. Risk characterization for human's health	28
Table 5. Vector distance components	36
Table 6. Input data of environmental characteristics for calibration and sensitivity analysis in MUSEM	39
Table 7. Input data of regional characteristics in Japan for calibration and sensitivity analysis in MUSEM	40
Table 8. Input data of physico-chemical properties for calibration and sensitivity analysis in MUSEM	45
Table 9. Emission volumes of chemicals to target area using PRTR data (kg/day)	51
Table 10. Input data of environmental characteristics for estimation of daily chemical intake using MUSEM	64
Table 11. Input data of physico-chemical properties and regional characteristics for estimation of daily chemical intake using MUSEM	66
Table 12. The chemical releases and transfers using reported facilities data of PRTR in Japan for estimation of daily chemical intake (kg/day)	67
Table 13. The estimated chemical releases using outside notification data of PRTR in Japan for estimation of daily chemical intake (kg/day)	68
Table 14. Biodegradation rates of each scenario for estimation of daily chemical intake (1/day)	68
Table 15. Average daily intake rates from food	69

Table 16. Daily intake per capita according to degradation rate in Continental area and Regional area (ug/kg/day)	72
Table 17. Input data of environmental characteristics for estimation of chemical exposure using MUSEM	76
Table 18. Input data of regional characteristics for estimation of chemical exposure using MUSEM	78
Table 19. The land classification for estimation of soil and fresh water area in Korea	78
Table 20. Input data of chemical emission volumes to each environmental compartments using TRI data	85
Table 21. Top 20 ranking from TRI data (point source and non-point source) in Busan (kg/day)	93
Table 22. Computed chemical concentration of multimedia environments in Busan using MUSEM	94
Table 23. Parameters of environmental compartment in MUSEM	104
Table 24. Input data for estimation of chemical ranking using POT	108
Table 25. The top 20 ranking from chemical concentration of each compartment in Busan, Korea	109
Table 26. The top 15 ranking from POT using the computed result of MUSEM in Busan, Korea	112

List of Figures

Fig. 1. Exposure and risk assessment for chemical substances	8
Fig. 2. The main modules of MUSEM	9
Fig. 3. The relationship between the exposure assessments at the different spatial scales	10
Fig. 4. Schemes of communal biological sewage treatment plants (SimpleTreat 3.0)	12
Fig. 5. Indirect exposure routes for humans through the environment	22
Fig. 6. Chemical emission volume database from TRI or PRTR data	30
Fig. 7. Chemical emission volume database from products and imports	30
Fig. 8. Database of physico-chemical properties	31
Fig. 9. Database of environmental monitoring data	31
Fig. 10. Selection of environmental scale on database of characteristics of Regional area	32
Fig. 11. An example of a Hasse diagram, the calculation of the ordinal ranking probabilities and the average rank	35
Fig. 12. Formal procedure to rank chemicals according to environmental hazard is explained by using six chemicals from Table 4. (a) Set chemicals at vertices of regular polygon, (b) rank chemical with one another, (c) remove redundant lines, and (d) rotate diagram and eliminate arrows, i.e., Hasse diagram	37
Fig. 13. Ranking probability for x_3 from Fig. 11	38
Fig. 14. Framework for evaluation and regulation of chemical substances in Japan under amended Chemical Substances Control law	43
Fig. 15. Determination of chemical emission flow to each compartments (air, freshwater, seawater, urban/industrial soil and STP) using PRTR result for MUSEM	49

Fig. 16. Simulation result of chemicals concentration in 47 Prefectures of Japan	54
Fig. 17. Chemicals distribution ratios in each compartment (%)	56
Fig. 18. Comparison of the observed and simulated chemicals concentration ..	57
Fig. 19. Sensitivity analysis of chemical concentrations by change of values of <i>Kow</i> (Regional area; Tokyo)	60
Fig. 20. Sensitivity analysis of chemical concentrations by change of values of <i>Kow</i> (Continental area; Japan except Tokyo)	61
Fig. 21. Sensitivity analysis of chemical concentrations by change of values of degradation rate (Regional area; Tokyo)	62
Fig. 22. Sensitivity analysis of chemical concentrations by change of values of degradation rate (Continental area; Japan except Tokyo)	63
Fig. 23. Comparison of daily intake per capita from model predictions between in Regional area and Continental area	71
Fig. 24. Intake fraction of 21 chemical substances per exposure pathway for model predictions in Regional area	73
Fig. 25. Comparison of daily intake per capita between in Regional area and Continental area (ug/kg/day)	74
Fig. 26. Comparison of daily intake per capita according to degradation rate (ug/kg/day)	74
Fig. 27. Top 10 of the emission load in Limitations of reported releases and transfers (point sources) and Limitations of estimated releases from outside notification (non-point sources)	81
Fig. 28. Calculation method of the emission to each compartment in MUSEM using the TRI data	83
Fig. 29. Mass distribution ratios of chemicals in four environmental media ..	105
Fig. 30. Hasse diagram for a partial order with 174 chemical substances and 8th environmental compartments	111

Ranking of chemical substances for risk assessment using a multi-media
environmental model and partial order theory

Kyong Joon Roh

*Department of Environmental Engineering, Graduate School,
Pukyong National University*

Abstract

Pollution by chemical substances such as POPs (Persistent Organic Pollutants), EDCs (Endocrine Disrupting Chemicals) and PBTs (Persistent Bio-accumulative and Toxic substances) in the ecosystem has become more complex and varied, increasing the possibility of irreversible damage to human health or the ecosystem.

Even at this moment, such chemical substances are continuously developed, manufactured and circulated, and accordingly the type and quantity of chemical substances flowing into the ecosystem are also increasing.

There are 100,000 or more chemical substances circulated around the world, and about 38,000 chemical substances are used in Korea. It has been reported that 2,000 or more new substances are developed and commercialized around the world and about 300 new chemical substances are introduced to Korean market each year. Furthermore, the circulation and production of such chemical substances is also continuously increasing around the world, and the introduction of and the support for environment-friendly chemical substances management policy have become the major issue of the international society. Therefore it is necessary to have a management priority setting system for various chemical substances is required for efficient management.

This study developed MUSEM (MUlti-media Simplebox-systems Environmental Model), a multimedia environmental model that can

simultaneously evaluate the possibility of exposure of hundreds of chemical substances in order to efficiently manage chemical substances that can have negative impact on human health or ecological environment through environmental contamination.

And in this study an alternative priority setting methods for the management of chemical substances in connection based on partial order theory (POT) and Hasse diagram. The theory of partial orders has been used to order chemical substances according to their negative effect on human health and the environment. POT is a simple technique that a priori includes " $\leq$ " as the only mathematical relation. The theory of partial orders is characterized as being based on fewer assumptions concerning functional relationships and does not apply weighting factors.

MUSEM executed the modeling for Japan by setting all 47 prefectures of Japan as the regional area for 62 chemical substances and the rest of the territory of Japan, excluding regional area, as the continental area and made the estimation of concentration among environment media in each administrative area and made the sensitivity analysis on Tokyo area.

This study calculated daily intake rate of chemical substances by human using the PRTR data concerning 21 chemical substances subjected to Type II monitoring chemical substances centering on the area which produced the highest amount of each chemical substance among 47 administrative areas of Japan. The daily intake rate of chemical substances estimated based on the model was evaluated by dividing cases into the "case 1 where the degradation rate constant is 0" and the "case 2 where the degradation rate constant is not 0" and applying them to MUSEM.

In case 1, the degradation rate was set to 0, and both regional and continental areas showed similar values for the substances with high transitivity to the atmosphere such as isoprene. As compared with the daily intake of case 1 which did not consider degradation, the daily intake of case 2 which considered the degradation decreased by 0.01%~50% (10% in average)

in the regional area and more in the continental area by 0.01%~16% (3% in average). This indicates that the degradation speed of chemical substances has greater impact on the estimation of the daily intake and that it is necessary to set values according to the actual conditions including the biological degradation and the degradation in water or air when evaluating the danger.

The study also calculated the concentration of exposure for 174 substances, the TRI data of which are available, in Busan, Korea, using the multimedia environmental model, MUSEM. The estimation was made for 8 different media (such as air, freshwater, seawater, natural soil, agricultural soil, urban/industrial soil, sediment in freshwater, and sediment in seawater), and the result of applying POT by simultaneously reflecting the distribution of the concentration of chemical substances in each of the said media showed the management priority for the chemical substances in Busan in the order of toluene, acetic acid, hydrogen chloride, azinphos-methyl, and acetaldehyde.

Keywords: chemical ranking; multi-media environmental model; TRI; PRTR; partial order theory; Hasse diagram; priority setting method; risk assessment

I. 서론

생태계로 유입되는 POPs (Persistent Organic Pollutant substances), EDCs (Endocrine Disrupting Chemicals), PBTs (Persistent Bio-accumulative and Toxic substances) 등과 같은 화학물질에 의한 오염은 점점 복잡·다양화되고 있으며, 사람의 건강이나 생태계에 돌이킬 수 없는 피해를 가져올 우려 또한 증가되고 있다.

이러한 화학물질은, 현 순간에도 지속적으로 신규물질이 개발·제조 및 유통되고 있으며, 생태계로 유입되는 물질의 수와 양도 증가되고 있다. 환경부(2005)에 의하면 전 세계적으로 유통되고 있는 화학물질의 수는 10만여종에 이르며 국내에서도 3만8천여종의 화학물질이 사용되고 있다. 또한 매년 2천여종의 새로운 물질이 개발되어 상품화되고 있으며, 국내의 경우도 매년 3백여종의 새로운 화학물질이 국내시장으로 진입되고, 화학물질의 유통량도 증가하고 있다. 뿐만 아니라 이러한 화학물질의 생산량 또한 국제적으로 지속적으로 증가하고 있어 환경 친화적 화학물질 관리정책의 도입 및 지원이 국제사회의 주요 현안으로 부각되고 있다(환경부, 2005).

따라서 이의 관리를 위해서는 여러 화학물질에 대한 위해성평가가 적절히 이루어져야 하나, 전 화학물질을 대상으로 모두 위해성평가를 실시하는 것은 무리이고, 모든 물질의 정보를 얻을 수 있다 하더라도 이는 시간과 노력의 낭비일 수밖에 없다(Van Leeuwen et al., 1996). 이러한 현실적 제약으로 인해 우선순위결정 기법의 필요성이 대두되고 있으며, 지난 20년간 수백가지의 기법들이 개발되어 왔다. 화학물질관리를 위한 우선순위결정 기법은 화학물질의 위해성확인단계에 해당하며, 분석의 방법 및 범위에 따라 위해성 관리단계에 직접적이거나 간접적으로 정보를 제공함과 동시에 기타 의사결정에 적절하고 유용한 정보를 제공하는 요소로써 중요성을 가진다(Swanson et al., 1997).

화학물질관리를 위한 우선순위결정기법(Priority Setting Method; PSM 또는 Chemical Ranking and Scoring; CRS)은 크게 다음과 같은 4가지로 분류할 수 있다(Weiss et al., 1988; Konemann and Visser, 1988; 한국화학연구소, 1995).

첫 번째는 이미 문제를 일으켰거나 일으킬 가능성이 큰 화학물질을 선정하는 방법으로, 가장 간단한 방법이라 할 수 있으나 장래 문제 유발 가능성 판단의

어려움과 환경문제를 일으키기 이전의 화학물질 사전관리에는 난점이 있다.

두 번째는 독성자료에 의존하는 방법이다. 독성은 인체독성(human health effect)과 환경독성(ecological effect)으로 구분하며 이중 하나만을 선택하거나 또는 두 가지를 동시에 고려하기도 하며, 역학조사결과나 동물독성시험결과, 구조-활성과의 정량적 상관관계(Quantitative Structure-Activity Relationships; QSAR)에 의한 결과(Mackay, 2003; Escher and Hermens, 2002) 등을 이용하기도 한다.

인체독성은 크게 급성독성(acute effect)과 만성독성(chronic effect)으로 나누어지며 만성독성에는 발암독성(carcinogenic effect)과 비발암독성(noncarcinogenic effect), 유전독성(genetic toxicity), 생식독성(reproductive toxicity) 등이 있다.

세 번째는 노출가능성이 큰 물질을 선정하는 기법으로 인간을 포함한 생물체가 접하는 각 환경매체중의 화학물질농도에 따라 결정되게 된다. 화학물질은 생산, 유통단계를 거쳐 환경중에 방출되며, 이는 대기, 물환경, 토양 등의 각 매체로 분배되며, 그 과정에서 여러 과정을 거쳐 일정량이 분해되고 나머지는 잔류하게 되며, 이때의 노출가능성은 일련의 과정을 거쳐 환경매체중에 잔류하는 유해물질이 인체 및 생물체에 노출되는 양을 반영한다.

환경매체중 화학물질농도는 그 적용의 어려움으로 인하여 물리화학적 성질(physico-chemical properties)에 해당하는 옥탄올-물 분배계수(K_{ow}), 증기압(vapor pressure), 끓는점(boiling point)을 노출항목으로 선정하거나, 화학물질의 생산량이나 배출량 등에 근거하여 추정하는 경우가 많으나, 보다 적절한 노출가능성평가를 위해서는 실측에 의한 방법이나 모델을 이용한 산정법 등이 추천된다.

네 번째는 독성(effect)과 노출가능성(exposure)의 두 항목을 동시에 감안하여 화학물질관리를 위한 우선순위를 결정하는 기법이다(Swanson et al., 1997). 위해성평가와 일치하지는 않지만 일관성을 갖고 있는 개념으로, 시스템 내에서 위험(hazard)과 노출(exposure)의 함수로 설명되는 화학물질의 위협(threat)을 지표로 우선순위를 도출하는 방법이다(Mary et al., 1997).

대부분의 경우, 순위결정을 위한 시스템은 네 번째 방법인 독성과 노출가능성에 기초하여 유해 영향을 유발하는 화학물질의 상대적 potential을 결정하고, 연구 활동이나 관리 방안에 필요한 우선순위를 산출하고자 하는 목적으로 개발되어 왔다. 일반적으로 이용되는 주된 인자는 노출 및 영향에 대한 것으로 지속성, 생물 농축성, 독성 등이고, 그 외에도 화학물질의 제조량이나 이용량, 이용 형태 등

에 관한 정보도 고려되었다(US EPA, 1994).

이상의 4가지 방법에서 순위결정은 주로 점수를 부여하여, 배점에 의한 방법(ranking and scoring)을 이용하고 있다(US EPA, 1998; Hansen et al., 1999). 독성의 경우는 급성독성, 발암성, 비발암성의 각각 개별항목을 배점법으로 하는 고(high)-중(medium)-저(low) 분류법, ordinal score법, order of magnitude score법 등이 있으며, 세 독성항목을 모두 고려하는 총점 계산법으로 전체 합산법, 최고점 택일법 등이 있다. 노출가능성의 경우는 화학물질의 생산량이나 사용량, 물리화학적 성질 또는 환경매체중의 농도 등 필요한 것을 노출항목으로 선정하고 각 항목당 일정한 점수를 부여하여 노출점수를 계산한다.

위해성평가 및 위해도 관리 대상 물질을 선정을 위한 EU의 EURAM (European Union Risk Ranking Method)과 US EPA의 SCRAM (Chemical Scoring and Ranking Assessment Model) 등이 이에 따른다. EURAM은 EU에서 위해성평가 및 위해도 관리 대상 물질을 선정하기 위한 근거가 되는 시스템으로, 유럽 내에서 생산용량이 연간 1,000톤 이상이 되는 물질(High Production Volume Chemicals; HPVCs)을 대상으로 하며, 주로 회원국들이 작성한 IUCLID (International Uniform Chemical Information Database) 내의 내용을 토대로 순위가 선정된다(Hansen et al., 1999). SCRAM 역시 미국에서 개발된 화학물질 우선순위 선정 시스템으로, 화학물질에 대한 잠재적 노출량이나 독성에 기초하며, 자료의 이용가능성에 대한 불충분함 정도를 점수로서 반영하도록 하였다. 즉, SCRAM에서는 화학물질의 고유한 특성, 정보의 부족, 또는 두 가지를 모두 결합하여 순위를 결정하고 제안하였다(Synder et al., 2000).

국내에서도 환경부에서 유독물질로 지정한 화학물질을 대상으로 우선순위선정을 위해 제안된 CRS-Korea (연세대와 환경부, 2003) 이외 민 등(1998)에 의한 유해물질의 함유농도와 규제기준간의 위해성점수를 이용한 위해성폐기물 관리를 위한 우선순위에 관한 연구, 차 등(2003)의 환경관리대상 오염물질의 우선순위를 위한 선정기법에 관한 연구 등이 있다.

이러한 배점법은 각각의 준거(대상 항목)에 점수를 부여하고 각 점수를 합하는 방식에 따라 전체 점수가 달라지고 결과적으로 물질의 순위가 달라진다(Mary et al., 1997).

순위결정법에 관한 또 다른 연구로 Halfon과 Reggiani (1986)는 위해성평가

를 위한 화학물질의 우선순위는 부분순서이론(Partial Order Theory, POT)으로 평가할 수 있다 하였다.

POT는 산술적 대소 관계 " $\leq$ " 만을 고려하는 선형대수의 간단한 순위결정 방법으로, 인간과 생태계환경에 미치는 화학물질의 영향이 부정적일수록 상위순위를 차지하여 관리우선대상으로 평가된다. POT는 순위를 결정함에 있어서 가중치나 점수배점을 이용하지 않으며, Hasse diagram과 Linear extention (LE)을 이용하여 랭킹의 가능성(ranking probability)을 제시한다(Hasse, 1952; Halfon and Reggiani, 1986; Halfon et al., 1996; Brüggemann et al., 1999).

POT는 위해성을 평가하고자 Halfon과 Reggiani (1986)에 의해 유해화학물질의 관리우선순위 선정에 도입된 이후, Brüggemann 등(1999)과 Sørensen (2003), 그리고 Lerche 등(2002a)에 의하여 농약 및 화학물질 등의 환경 모니터링 데이터 분석에 이용되었다. Voigt 등(2004)은 POT를 대기오염물질 모니터링 데이터 분석에, Voigt 등(2006)은 환경 데이터베이스 분석에 적용하였으며, Brüggemann 등(2004)은 POT를 이용한 순위결정 소프트웨어 개발에 관하여 연구하였다.

화학물질관리 우선순위결정에 관한 연구로는 Lerche 등(2004)에 의한 일본의 PRTR자료에 근거한 연구와 Carlsen (2006)의 QSAR과 POT를 이용한 연구 등이 있다. Lerche 등(2002b)은 85종의 화학물질을 대상으로 하여 POT와, 점수 배점에 의한 COMMPS (COMbined Monitoring-based and Modelling-based Priority setting Scheme) 각각에 따른 우선순위의 비교·평가를 통해 POT의 적용성을 밝혔다.

따라서 본 연구에서는 위해성평가를 위한 국내 화학물질 관리우선순위 결정 기법에 있어, 순위결정시 점수 배점을 위한 복잡한 함수의 가정이나 가중치를 필요로 하지 않는 POT를 도입하고자 한다.

또한, 위해성평가를 위한 화학물질 관리우선순위 결정기법은 가능하다면 독성과 노출가능성을 동시에 고려하는 네 번째 방법이 가장 바람직하나, 환경문제를 야기시켜 본격적인 조사가 진행된 일부 물질을 제외한 대부분의 경우 기본적인 물성치 이외의 환경매체중의 농도, 생태계내의 거동, 생물 혹은 인체에 대한 독성 등의 정보는 부족한 실정이다.

그러므로 현재까지 위해성평가를 위한 화학물질의 우선순위결정에 관하여 Davis 등(1994)의 연구를 비롯하여 Swanson 등(1997), Snyder 등(2000), 차 등

(2003)의 많은 국내외 연구에서는 화학물질의 노출가능성에 있어서 배출량자료나 화학물질의 물리화학적 특성치에 배점하여 순위를 결정하는 경우가 대부분으로, 순위를 결정함에 있어 화학물질의 노출량 산정 부분에 적절한 평가가 이루어지지 않는 경우가 많았다.

따라서 화학물질에 대한 정보가 충분한 경우뿐만 아니라 독성 실험자료가 있는 물질과 없는 물질이 혼재 하거나 환경매체중의 모니터링 자료가 빈약한 경우에도, 보다 적절한 위해성평가가 가능하도록 다매체환경(대기, 물환경, 토양, 저질 등)중 화학물질 거동 및 운명을 예측 평가할 수 있는 수치모델을 이용한 시스템의 도입이 필수적이라 하겠다.

다매체환경에서의 화학물질 운명예측에 관한 대표적인 모델로는 Fugacity model I, II, III, IV (Cahill et al., 2003), EQC model (Mackay et al., 1996), CalTOX (California EPA, 1993), MNSEM2 (Environment Agency of Japan, 1993), USES (Polder et al., 1998; Van Leeuwen et al., 1996) 등이 있다. 국내에서는 박 (EQC, 2003), 김 등(EQC, 2005), 김(ECORAME, 2005) 등이 다매체 모델의 개량 및 적용에 관하여 연구 보고하고 있다. 이러한 기존의 연구에서 화학물질의 거동 및 운명 예측시 적용된 모델은 하나 또는 수개의 물질에 대한 모델링에는 유용한 점이 있으나 우선순위결정의 경우와 같이 관리대상인 수십 또는 수 백종의 화학물질을 동시에 시뮬레이션하여 환경매체중의 농도를 산정, 비교·평가하는 데는 많은 제약을 가지고 있었다.

그러므로 본 연구에서, 화학물질관리에 있어 위해성평가지 이용되는 보다 효율적인 모델링 수행을 위하여 화학물질의 물성 데이터베이스 및 지역 개황 데이터베이스 등과 프로그램으로 연계 되어 있으며, 동시에 여러 대상물질이 자동적으로 시뮬레이션 가능한 다매체환경모델 MUSEM (MULTi-media Simple box-systems Environmental Model)을 개발하였다.

따라서 본 연구의 목적은 국내 화학물질관리를 위한 위해성평가지 필요한 관리우선순위 결정기법에 POT를 도입하고, 본 연구에서 개발한 다매체환경모델(MUSEM)을 이용한 노출가능성 평가결과와 결합하여 관리우선순위 결정시스템을 구축함에 있다.

본 연구에서 개발된 MUSEM을 이용하여 62종의 화학물질에 대하여 일본 47개 지역의 환경매체 중 농도예측 및 동경지역에 대한 민감도 분석을 실시하였으

며, 21종 화학물질에 대한 인간 섭취량 평가 등을 통하여 모델의 적용성을 검토하였다. 또한 부산지역에 대하여 174종의 화학물질을 대상으로 하여 MUSEM으로 환경매체중 화학물질 농도를 산정하고 POT에 기반한 순위를 평가하여 관리가 우선시 되는 화학물질의 순위를 결정하였다.



II. 재료 및 방법

1. 다매체환경모델의 개발

1.1 다매체환경모델의 개요

환경오염을 통해 인간의 건강이나 생태계환경에 좋지 않은 영향을 미칠 우려가 있는 화학물질의 잠재적 영향을 미연에 방지하기 위해서는 과학적인 노출평가 기법을 이용한 효율적인 관리가 필요하다. 노출평가는 화학물질을 직접측정하거나 모델을 이용하여 계산함으로써 가능하지만, 새로운 화학물질이나 물성치 등의 조사 연구가 아직 이루어지지 않는 물질에 대해서는 모델에 의존할 수밖에 없다.

본 연구에서는 SimpleBox모델을 근간으로 하여 수십 또는 수백종의 화학물질을 동시에 시뮬레이션이 가능하도록, 환경매체중의 화학물질 농도와 거동을 산정·비교하는 등의 화학물질 위해성평가를 위한 다매체환경모델 MUSEM (Multi-media Simplebox-systems Environmental Model)을 개발하였다(Roh et al., 2004a; Roh et al., 2004b; Shiraishi and Roh, 2004).

화학물질은 Fig. 1과 같이 환경매체로 배출·이동된 후 이류, 확산, 분해 등의 기작을 통해 대기, 물, 토양, 저질 등의 다매체중에 잔류하며, 노출과 섭취를 통해 생체반응을 일으켜 독성을 나타내는 일련의 환경매체중 거동 및 운명을 거친다.

다매체환경모델 MUSEM은 환경매체중의 화학물질이 다매체를 통하여 인간의 건강이나 생태계에 미치는 영향을 파악하고자 개발되었으며, 화학물질 거동 및 관련 독성 자료를 기초로 하여 위해성평가를 행할 수 있다. 본 모델은 Fig. 1의 모두를 표현하고자, ① 모델링을 위한 화학물질의 물성 등의 입력, ② 화학물질의 배출량산정, ③ 환경중 화학물질 거동예측, ④ 각 환경매체로부터 화학물질 섭취량 산정의 노출평가, ⑤ 위해성평가 지침치의 선정, ⑥ 위해성평가의 6가지 Main Module로 구성되어 있다(Fig. 2).

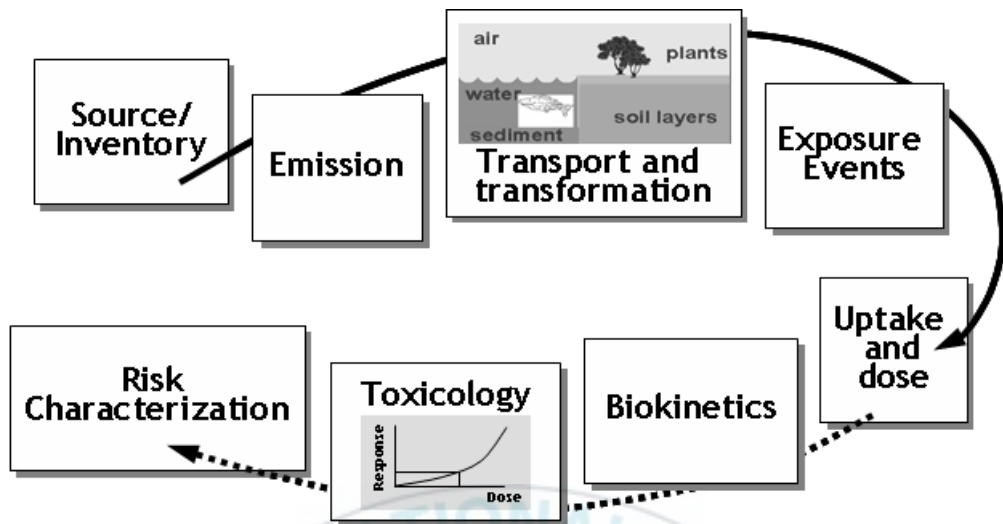


Fig. 1. Exposure and risk assessment for chemical substances (<http://eetd.lbl.gov/ied/era>).

즉, 모델을 수행하기 위해서는 우선적으로 모델링을 위해 분자량, 용해도, 옥탄올-물 분배계수 등 대상 물질의 물리화학적 성질과 그 외의 초기값을 설정한다. 각 영역으로 배출된 화학물질은 이류확산 및 분해 등의 환경기작을 통해 환경매체에 잔류하게 되며, 인간을 포함한 생물체에 미치는 노출량을 산정한다. 나아가 대상물질의 독성자료를 이용하여 노출로 인한 위해성평가가 이루어진다.

화학물질 배출에서부터 노출 영향을 평가하기 위한 각 Module의 보다 상세한 내용은 Table 1과 같다.

화학물질의 환경중 거동을 파악하고자 MUSEM의 Environmental scale은 다매체환경 규모를 주로 200km²이내의 범위인 Regional scale (연구대상지역)과 연구대상지역의 주변을 둘러싸고 있는 국가규모의 Continental scale (1900km²이내), 그리고 Continenttal scale을 포함하는 지구규모의 Global scale (북반구)로 구분하였다(Fig. 3).

환경매체중 농도 예측에는 SimpleBox 2.0 (Van de Meent, 1933; Brendes et al., 1996)를 submodule로 이용하였으며, SimpleBox 2.0는 Mackay Type의 level III (비평형·정상상태)이며, 환경매체로 배출된 화학물질의 이류, 확산, 분해, 흡착 등을 고려한다(Table 2).

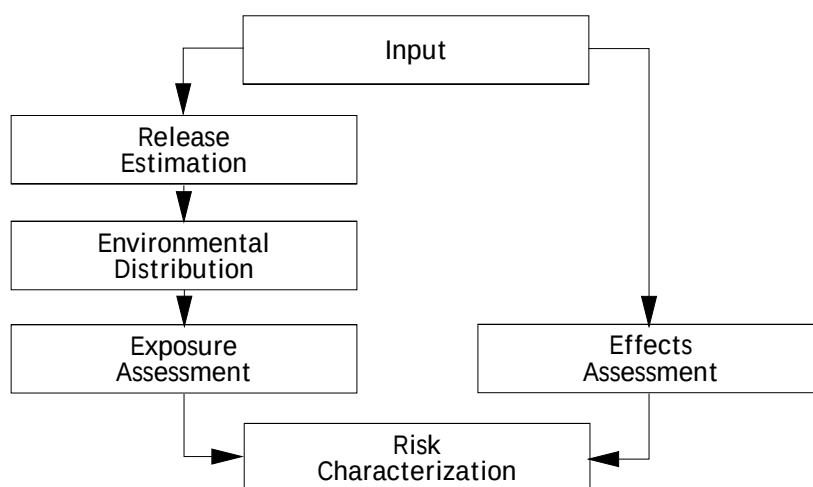


Fig. 2. The main modules of MUSEM.

Table 1. The structure of the MUSEM main modules

Main module	Content
Input	substance identification physico-chemical properties
Release Estimation	continental and regional emission
Environmental Distribution	partition coefficients degradation rates sewage treatment plant model (SimpleTreat 3.0) continental and regional box model (Mackay-type level III multimedia model SimpleBox 2.0)
Exposure Assessment	bioconcentration factors secondary poisoning human exposure through environment consumer products, and as a worker
Effects Assessment	PNECs (Predicted No-Effect Concentration) for environmental end-points
Risk Characterization	Risk Characterization Ratio (RCRs = PEC / PNEC) Margines of Safety (MOS)

Table 2. Multimedia environmental models: The fugacity approach (Mackay and Paterson, 1981)

Content		Detailed description
Level I	equilibrium, steady-state, no-flow system	• Most pollutants will move from one environmental phase to another, e.g. dissolution, volatilization, sorption • Partitioning theory describes the equilibrium state for phase transfer reactions • Fugacity approach simplifies calculations for multi-phase systems • There is no reaction, inflow, or outflow
Level II	equilibrium steady-state flow system	• Consider contaminant degradation reactions : biodegradation, photolysis, hydrolysis • Very complex at the reaction level, especially biodegradation - need to consider large number of reactions, organisms, chemical parameters, etc
Level III	nonequilibrium steady-state flow system	• Based on the law of conservation of mass within an appropriately defined system • Use materials balance approach to account for transport and transformation processes of all constituents
Level IV	nonequilibrium unsteady-state flow system	• Resulting differential equations are solved for concentrations of interest

MUSEM의 Environment compartments는 Regional area와 Continental area의 각각의 scale에 대해서 대기, 물환경(육수역, 해수역으로 구분), 토양(자연지, 농지, 도시·산업용지로 구분), 저질(육수역, 해수역으로 구분)의 8개의 환경매체로 구성, 화학물질 농도 예측을 위한 최소단위로 다루었다.

모델입력을 위한 환경중의 화학물질의 배출량은 실제의 배출량이 알려져 있는 경우에는 그 자료를 그대로 사용가능하지만, 자료가 없는 경우에는 배출시나리오를 근거로 산출해야한다. 환경으로 배출되는 화학물질 중 발생원이나 주택으로부터 하수에 혼입되어 배출되는 경우의 화학물질을 고려하고자 하수처리장(STP) 수치모델인 SimpleTreat 3.0 (Struijs et al., 1991; Struijs, 1996)을 MUSEM의 submodule로 삽입하였다. SimpleTreat에서는 Fig. 4와 같이 하수처리 및 방류과정을 통해 대기, 하천, 농지(슬러지)로 배출되는 화학물질의 양을 추정한다.

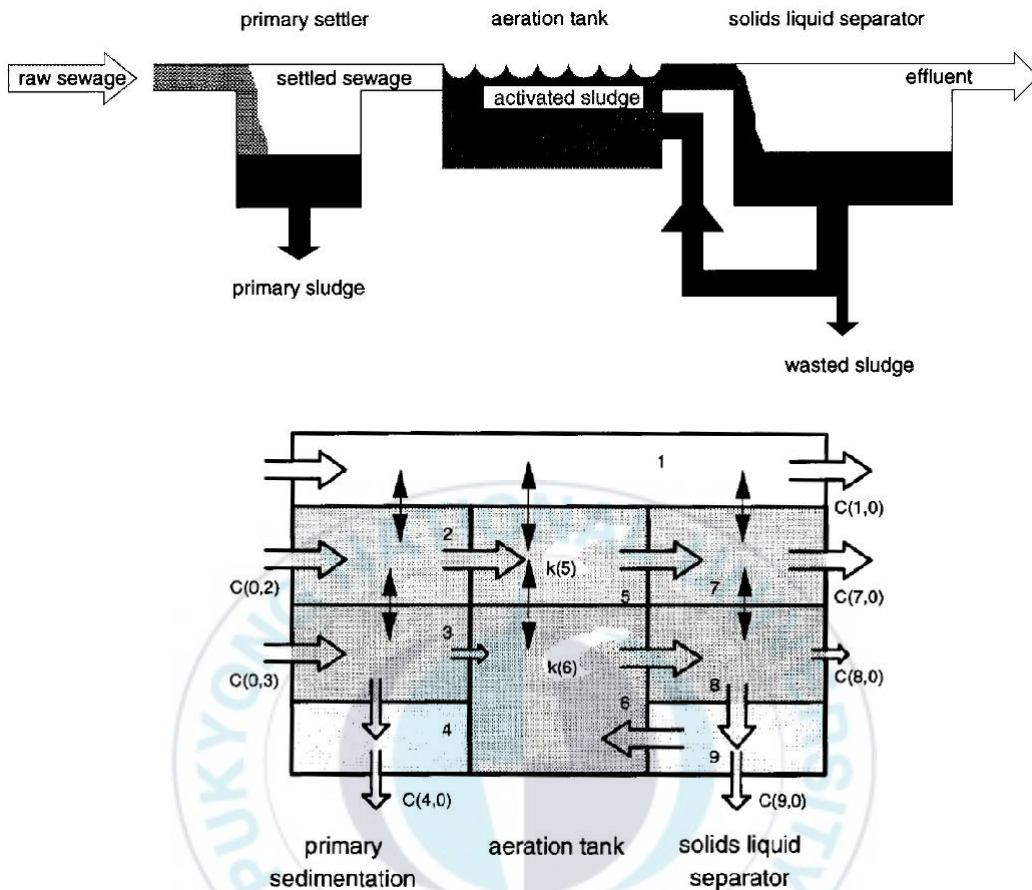


Fig. 4. Schemes of communal biological sewage treatment plants (SimpleTreat 3.0).

1.2 환경매체중 화학물질의 물질수지

MUSEM내의 노출에 의한 화학물질 농도는 질량 보존 법칙을 응용하며, 각 환경매체에 잔류하는 물질의 양은 다음의 물질 수지 방정식을 따른다. Fig. 3과 같이 유입원은 대상지역에서 발생하는 배출량과 대상지역 외측에서 대기 이동과 강우 및 폐수의 유입 등으로 정의하며, 소실원은 대상지역 외측으로의 대기이동과 하천이나 해수에 의한 유출 및 분해 등을 고려한다.

1.2.1 대기

대기중의 화학물질은 균일하게 혼합된 것으로 간주하며, 농도의 변화는 배출, 이동, 분해 등의 과정에서 발생한다.

$$\begin{aligned}
 V_{air} \frac{dC_{air}}{dt} = & EMIS_{air} - V_{air} DEG_{air} C_{air} - \sum DEP_{water_i} C_{air} - \sum DEP_{soil_i} C_{air} \\
 & - \sum XCH_{air-water_i} C_{air} - \sum XCH_{air-soil_i} C_{air} \dots\dots\dots (1) \\
 & + \sum XCH_{water_i-air} C_{water_i} + \sum XCH_{soil_i-air} C_{soil_i}
 \end{aligned}$$

여기서;

V_{air} : 대기의 체적(m^3_{air})

C_{air} : 대기중 화학물질 몰농도(mol/m^3_{air})

t : 시간(s)

$water_i$: 대상 수계($water_1$: 육수역, $water_2$: 해수역)

$soil_i$: 대상 토양($soil_1$: 자연지, $soil_2$: 농지, $soil_3$: 도시·산업용지)

$EMIS_{air}$: 대기로 배출되는 화학물질량(mol/sec)

DEG_{air} : 대기중 화학물질의 1차분해속도상수($1/sec$)

$\sum DEP_{water_i} C_{air}$: 대기에서 물로 이류에 의한 화학물질 이동 항(mol/sec)

$\sum DEP_{soil_i} C_{air}$: 대기에서 토양으로 이류에 의한 화학물질 이동 항(mol/sec)

$\sum XCH_{air-water_i} C_{air}$: 대기에서 물로 확산에 의한 화학물질 이동 항(mol/sec)

$\sum XCH_{air-soil_i} C_{air}$: 대기에서 토양으로 확산에 의한 화학물질 이동 항(mol/sec)

$\sum XCH_{water_i-air} C_{water_i}$: 물에서 대기로 확산에 의한 화학물질 이동 항(mol/sec)

$\sum XCH_{soil_i-air} C_{soil_i}$: 토양에서 대기로 확산에 의한 화학물질 이동 항(mol/sec)

1.2.2 물환경

물환경중의 화학물질은 물의 이류와 분산에 의한 이동, 물과 침전물사이의 분배, 수표면에서의 휘발, 생물학적 혹은 비생물학적 분해 등에 의한 환경매체중

거동을 고려하여 농도변화를 추정할 수 있다.

$$\begin{aligned}
 V_{water_i} \frac{dC_{water_i}}{dt} = & EMIS_{water_i} - V_{water_i} DEG_{water_i} C_{water_i} \\
 & + \sum DEP_{water_i} C_{air} + \sum RUNOFF_{soil_i} C_{soil_i} \dots\dots\dots (2) \\
 & - \sum XCH_{water_i - air} C_{water_i} - \sum XCH_{water_i - sed_i} C_{water_i} \\
 & + \sum XCH_{air - water_i} C_{air} + \sum XCH_{sed_i - water_i} C_{sed_i}
 \end{aligned}$$

여기서;

V_{water} : 물환경 체적(m^3_{water})

C_{water} : 물환경중 화학물질 물농도(mol/m^3_{water})

sed_i : 대상 저질(sed_1 : 육수역의 저질, sed_2 : 해수역의 저질)

$EMIS_{water}$: 물환경으로 배출되는 화학물질량(mol/sec)

DEC_{water} : 물환경중 화학물질 1차분해속도상수($1/sec$)

$\sum RUNOFF_{soil_i} C_{soil_i}$: 강우유출에 의한 화학물질 이동 항(mol/sec)

$\sum XCH_{water_i - sed_i} C_{water_i}$: 물에서 저질로 확산에 의한 화학물질 이동 항(mol/sec)

$\sum XCH_{sed_i - water_i} C_{sed_i}$: 저질에서 물로 확산에 의한 화학물질 이동 항(mol/sec)

1.2.3 토양

$$\begin{aligned}
 V_{soil_i} \frac{dC_{soil_i}}{dt} = & EMIS_{soil_i} - V_{soil_i} DEG_{soil_i} C_{soil_i} \\
 & - \sum LEACHING_{soil_i} C_{soil_i} - \sum RUNOFF_{soil_i} C_{soil_i} \dots\dots\dots (3) \\
 & + \sum DEP_{soil_i} C_{air} - \sum XCH_{soil_i - air} C_{soil_i} + \sum XCH_{air - soil_i} C_{air}
 \end{aligned}$$

여기서;

V_{soil} : 토양의 체적(m^3_{soil})

C_{soil} : 토양중 화학물질 농도(mol/m^3_{soil})

$EMIS_{soil}$: 토양으로 배출되는 화학물질량(mol/sec)

DEG_{soil} : 토양중 화학물질 1차분해속도상수(1/sec)

$\sum LEACHING_{soil_i} C_{soil_i}$: 토양침출에 의한 화학물질 이동 항(mol/sec)

1.2.4 저질

$$\begin{aligned}
 V_{sed_i} \frac{dC_{sed_i}}{dt} = & - V_{sed_i} \cdot DEG_{sed_i} C_{sed_i} \\
 & - \sum SEDBURIAL_{sed_i} C_{sed_i} - \sum RESUSPENSION_{sed_i} C_{sed_i} \dots\dots\dots (4) \\
 & + \sum SEDIMENTATION_{water_i} C_{water_i} \\
 & - \sum XCH_{sed_i - water_i} C_{sed_i} + \sum XCH_{water_i - sed_i} C_{water_i}
 \end{aligned}$$

여기서;

V_{sed} : 저질의 체적(m^3)

C_{sed} : 저질중 화학물질농도(mol/m^3)

DEG_{sed} : 저질중 화학물질 1차분해속도상수(1/sec)

$SEDBURIAL_{sed_i} C_{sed_i}$: 저질의 매물에 의한 화학물질 이동 항(mol/sec)

$RESUSPENSION_{sed_i} C_{sed_i}$: 재부유에 의한 화학물질 이동 항(mol/sec)

$SEDIMENTATION_{water_i} C_{water_i}$: 침강에 의한 화학물질 이동 항(mol/sec)

1.3 환경매체간 화학물질의 분배평형

하나 이상의 환경매체중 평형상태에 도달하지 못한 화학물질은 다른 매체로 이동하려는 경향을 가지며, 이때의 다른 두 매체간의 이동률은 fugacity로 표현되는 수학적으로 표현한 양적개념을 이용한다. Mackay (1979)는 이러한 방식으로 평형상태를 표현, 다매체환경계(multi-compartmental environmental system)에 존재하는 화학물질의 복잡한 거동을 평가하고, 매체간에 분배되는 화학물질의 양을 예측하였다.

다양한 환경매체중의 대기-에어로졸, 대기-물, 고형물-물간의 분배계수(partition coefficient)는 다음과 같다.

1.3.1 대기-에어로졸간의 평형

에어로졸 입자는 침적과 재부유를 통해, 대기중의 화학물질 거동을 결정하는 주된 인자이나, 입자의 특성상 대기-에어로졸의 분배계수는 잘 알려져 있지 않아 일반적으로 에어로졸상에 존재하는 화학물질의 분율로 나타낸다(Junge, 1977).

$$F_{ass_{aer}} = \frac{CON_{junge} SURF_{aer}}{Vp_L + CON_{junge} SURF_{aer}} \dots\dots\dots (5)$$

여기서,

$F_{ass_{aer}}$: 대기중 에어로졸 입자에 흡착된 화학물질의 분율(-)

CON_{junge} : Junge 상수(Pa·m)

$SURF_{aer}$: 에어로졸 입자의 표면적(1/m)

Vp_L : 액체 상태에서의 증기압(Pa)

화학물질의 증기압(Vp)은 환경중의 온도와 물리적 상태를 같은 조건하로 보정하기 위해 다음의 식을 따른다.

$$\begin{aligned} T_{melt} \leq T(\text{substance is liquid}), Vp_L &= Vp \\ T_{melt} > T(\text{substance is solid}), Vp_L &= \frac{Vp}{e^{6.79 \left(1 - \frac{T_{melt}}{T}\right)}} \dots\dots\dots (6) \end{aligned}$$

여기서,

T_{melt} : 화학물질의 녹는점(K)

T : 실온(K)

Vp : 화학물질의 증기압(Pa)

1.3.2 대기-물환경간의 평형

일정 증기압을 가지고 있는 화학물질에 대한 대기-물환경간의 분배계수는 다음과 같다.

$$K_{air-water} = \frac{HENRY}{RT} \dots\dots\dots (7)$$

여기서;

$K_{air-water}$: 대기-물환경 분배율(-)

$HENRY$: Henry 상수($\text{Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol}$)

R : 기체 상수 ($8.314 \text{Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol/K}$)

$$HENRY = \frac{V_p Mol}{SOL} \dots\dots\dots (8)$$

여기서;

Mol : 화학물질의 분자량(kg/mol)

SOL : 화학물질의 용해도(kg/m^3)

1.3.3 고형물(토양, 부유물질, 저질 등)-물환경간의 평형

유기탄소와 물간의 분배계수를 이용하여, 고형물(토양, 부유물질, 저질 등)과 물간의 분배계수를 추정, 흡착용량을 결정하며, 환경중의 유기화학물질의 거동을 설명한다. 이는 흡착에 있어서 유기탄소 함량(F_{oc})이 화학물질거동을 제어하는 주요 인자로 작용함을 의미한다.

$$K_{soil-water} = F_{air_{soil}} K_{air-water} + F_{water_{soil}} + F_{solid_{soil}} Kp_{soil} P_{solid} \dots\dots\dots (9)$$

여기서;

$K_{soil-water}$: 토양-물 분배율(-)

$F_{air_{soil}}$: 토양중의 공기 분율(-)

$F_{water_{soil}}$: 토양의 물 분율(-)

$F_{solid_{soil}}$: 토양중의 고형물 분율(-)

Kp_{soil} : 토양의 고형물-물 분배계수(m^3/kg)

P_{solid} : 고형물의 밀도(kg/m^3)

$$Kp_{soil} = F_{oc_{soil}} K_{oc} \dots\dots\dots (10)$$

여기서;

$F_{oc_{soil}}$: 토양중의 유기탄소 분율(-)

K_{oc} : 유기탄소-물 분배계수(m^3/kg), $K_{oc} = \frac{1.26K_{ow}^{0.81}}{1000}$

K_{ow} : 옥탄올-물 분배계수(-)

$$K_{susp-water} = F_{water_{susp}} + F_{solid_{susp}} Kp_{susp} P_{solid} \dots\dots\dots (11)$$

여기서;

$K_{susp-water}$: 부유물질-물 분배율(-)

$F_{water_{susp}}$: 부유물질중의 물 분율(-)

$F_{solid_{susp}}$: 부유물질중의 고형물 분율(-)

Kp_{susp} : 부유물질의 고형물-물 분배계수(m^3/kg), $Kp_{susp} = Foc_{susp} K_{oc}$

Foc_{susp} : 부유물질중의 유기탄소 분율(-)

$$K_{sed-water} = F_{water_{sed}} + F_{solid_{sed}} Kp_{sed} P_{solid} \dots\dots\dots (12)$$

여기서;

$K_{sed-water}$: 저질-물 분배율(-)

$F_{water_{sed}}$: 저질중의 물 분율(-)

$F_{solid_{sed}}$: 저질중의 고형물 분율(-)

Kp_{sed} : 저질의 고형물-물 분배계수(m^3/kg), $Kp_{sed} = Foc_{sed} K_{oc}$

Foc_{sed} : 저질중의 유기탄소 분율(-)

1.4 환경매체중 화학물질의 분해

화학물질은 산화, 광분해, 가수분해 등의 비생물적인 분해나 미생물에 의해 생분해가 일어나면서, 다른 환경매체로 이동된다. 일반적으로 각 환경매체(대기, 물환경, 토양, 저질, STP)중의 분해속도의 측정치는 없는 경우가 많은데, 본 수치모델에서는 실험에 의해 확보된 대기중 광화학반응이나 물환경중의 가수분해, 광분해, 생분해 등의 1차분해속도상수를 이용한다. 본 수치모델은 Zahn-Wellens테스트와 MITI-II테스트에 의한 Table 3의 4가지 조건중에서 선택가능하며, 직접적으로 수치의 입력도 가능하다(Linders, 1998; Linders, 2002).

Table 3. Rate constants and half-lives for biodegradation: extrapolation from the biodegradation screening tests (day)

Test result	Readily biodeg.	Readily biodeg., but failing 10 days window	Inherently biodeg.	Not biodeg.
$DT50_{hydr\ water}$		1 ~ 106		-
$DT50_{photowater}$		1 ~ 106		-
$DT50_{biowater}$	15	50	150	-
$DT50_{biosoil}$ $Kp_{soil} \leq 0.1$	30	90	300	
$0.1 < Kp_{soil} \leq 1.0$	300	900	3000	-
$1.0 < Kp_{soil} \leq 10$	3000	9000	30000	
$DT50_{bio-aer\ sed}$ $Kp_{sed} \leq 0.1$	30	90	300	
$0.1 < Kp_{sed} \leq 1.0$	300	900	3000	-
$1.0 < Kp_{sed} \leq 10$	3000	9000	30000	
$DT50_{bio\ STP}$	0.029	0.096	0.29	-

Zahn-Wellens test : Pass level must be reached within 7days, log-phase (time window) should be no longer than 3days, percentage removal in the test before biodegradation occurs should be below 15%.

MITI-II test : Pass level must be reached within 14days, log-phase(time window) should be no longer than 3 days.

1.4.1 대기

$$k_{deg_{air}} = k_{OH} OHCONC_{air} \dots\dots\dots (13)$$

여기서;

$k_{deg_{air}}$: 대기중의 화학물질의 1차분해속도상수(1/day)

k_{OH} : 대기중 OH라디칼과의 반응속도상수($m^3/mol/day$)

$OHCONC_{air}$: 대기중 OH라디칼농도(mol/m^3)

1.4.2 물환경

$$\begin{aligned}
 k_{deg_{water}} &= k_{hydr_{water}} + k_{photo_{water}} + k_{bio_{water}} \\
 &= \frac{\ln 2}{DT50_{hydr_{water}}} + \frac{\ln 2}{DT50_{photo_{water}}} + \frac{\ln 2}{DT50_{bio_{water}}} \dots\dots\dots (14)
 \end{aligned}$$

여기서;

- $k_{deg_{water}}$: 물환경중 화학물질 1차분해속도상수(1/day)
- $k_{hydr_{water}}$: 수표면에서 가수분해에 의한 화학물질 1차분해속도상수(1/day)
- $k_{photo_{water}}$: 수표면에서 광분해에 의한 화학물질 1차분해속도상수(1/day)
- $k_{bio_{water}}$: 물환경중에서 생분해에 의한 화학물질 1차분해속도상수(1/day)
- $DT50_{hydr_{water}}$: 수표면에서 가수분해에 의한 화학물질 반감기(day)
- $DT50_{photo_{water}}$: 수표면에서 광분해에 의한 화학물질 반감기(day)
- $DT50_{bio_{water}}$: 물환경중에서 생분해에 의한 화학물질 반감기(day)

1.4.3 토양

$$\begin{aligned}
 k_{deg_{soil}} &= k_{bio_{soil}} + k_{abio_{soil}} \\
 &= \frac{\ln 2}{DT50_{bio_{soil}}} + k_{abio_{soil}} \dots\dots\dots (15)
 \end{aligned}$$

여기서;

- $k_{deg_{soil}}$: 토양중 화학물질 1차분해속도상수(1/day)
- $k_{bio_{soil}}$: 토양중 생분해에 의한 화학물질 1차분해속도상수(1/day)
- $k_{abio_{soil}}$: 토양중 비생물적 환경에 의한 화학물질 1차분해속도상수(1/day)
- $DT50_{bio_{soil}}$: 토양중 생분해에 의한 화학물질 반감기(day)

1.4.4 저질

$$\begin{aligned}
 k_{deg_{sed}} &= F_{aer_{sed}} k_{bio_{aer_{sed}}} + (1 - F_{aer_{sed}}) k_{bio_{anaer_{sed}}} + k_{abio_{sed}} \\
 k_{bio_{aer_{sed}}} &= \frac{\ln 2}{DT50_{bio_{aer_{sed}}}} \dots\dots\dots (16)
 \end{aligned}$$

여기서;

$k_{deg_{sed}}$: 저질중 화학물질 1차분해속도상수(1/day)

$F_{aer_{sed}}$: 저질중 호기성분율(-)

$k_{bio_{aer_{sed}}}$: 저질중 호기성 생분해에 의한 화학물질 1차분해속도상수(1/day)

$k_{bio_{anaer_{sed}}}$: 저질중의 혐기성생분해에 의한 화학물질 1차분해속도상수(1/day)

$k_{abio_{sed}}$: 저질중의 비생물적 환경에 의한 화학물질의 1차분해속도상수(1/day)

$DT50_{bio_{aer_{sed}}}$: 토양중의 생분해에 의한 화학물질 반감기(day)

1.4.5 STP(하수처리장중 분해)

$$\begin{aligned} k_{deg_{STP}} &= k_{bio_{STP}} + k_{abio_{STP}} \\ &= \frac{\ln 2}{DT50_{bio_{STP}}} + k_{abio_{STP}} \end{aligned} \quad \dots\dots\dots (17)$$

여기서;

$k_{deg_{STP}}$: STP중의 화학물질 1차분해속도상수(1/day)

$k_{bio_{STP}}$: STP중 생분해에 의한 화학물질 1차분해속도상수(1/day)

$k_{abio_{STP}}$: STP중 비생물적 환경에 의한 화학물질 1차분해속도상수(1/day)

$DT50_{bio_{STP}}$: 토양중 생분해에 의한 화학물질 반감기(day)

1.5 환경매체에 의한 노출평가

생산, 유통단계를 거쳐 환경중으로 방출된 화학물질은 대기, 수질, 토양 등의 각 매체로 확산되며, 여러 과정을 거쳐 일정량이 분해되고 나머지는 잔류한다. 이때의 노출가능성은 일련의 과정을 거쳐 환경매체중에 잔류하는 유해물질이 인체 및 생체에 노출되는 양을 반영한다.

환경중의 각 매체로부터 화학물질 섭취량을 산정하기위한 노출평가모델은 사람의 경우 섭취하는 공기, 식료품, 음료수, 토양 등에 함유되어 있는 화학물질의 농도를 환경농도로부터 추정, 여기에 각 매체의 섭취량을 고려하여 잠재용량을 평

가한다(Fig. 5). 환경매체와 섭취매체간의 평형상태가 성립한다고 가정하여, 각 매체간 화학물질의 이동과 그 결과로 유발되는 환경매체내의 농도와 분배계수를 이용하여 섭취매체중의 농도를 산출하며, 수식은 다음과 같다.

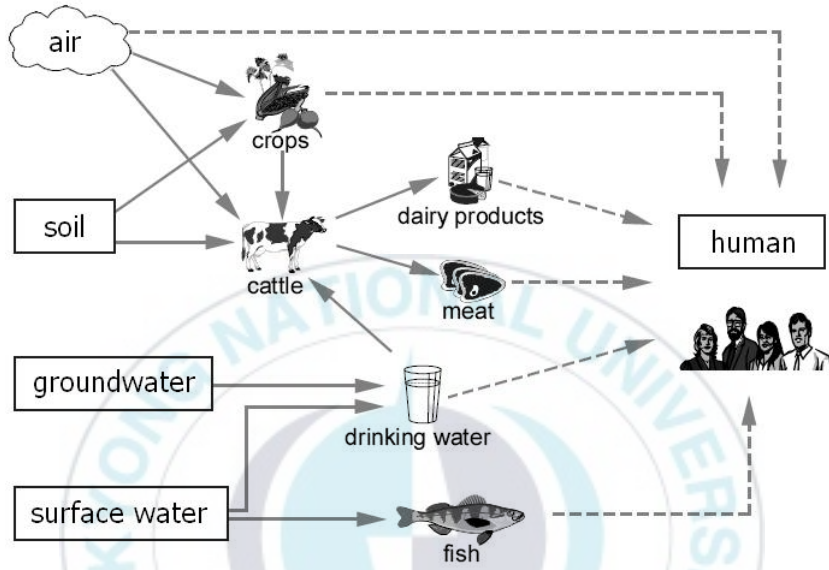


Fig. 5. Indirect exposure routes for humans through the environment.

1.5.1 어류

$$C_{fish_i} = BCF_{fish} C_{water_i} \dots\dots\dots (18)$$

여기서;

C_{fish} : 어류 체내의 화학물질 농도(kg/kg_{fish})

$fish_i$: 어류의 대상서식지($fish_1$: 육수역, $fish_2$: 해수역)

BCF_{fish} : 물환경으로 부터 어류로의 화학물질 생물농축계수(m^3_{water}/kg_{fish})

$$\log Kow \leq 6, \log BCF_{fish} = 0.85 \log Kow - 0.07 - 3$$

(단, $\log Kow \leq 1$ 인 경우 $\log Kow = 1$)

$$\log Kow > 6, \log BCF_{fish} = -0.20 (\log Kow)^2 + 2.74 \log Kow - 4.72 - 3$$

(단, $\log Kow \geq 10$ 인 경우 $\log Kow = 10$)

1.5.2 식물

$$C_{root} = \frac{K_{plant-water} C_{soil_2, porew}}{RHO_{plant}} \dots\dots\dots (19)$$

$$C_{leaf} = \frac{BETA_{leaf}}{ALPHA} \frac{1}{RHO_{plant}} \dots\dots\dots (20)$$

$$C_{grass} = \frac{BETA_{grass}}{ALPHA} \frac{1}{RHO_{plant}} \dots\dots\dots (21)$$

여기서;

C_{root} : 식물 뿌리조직중의 화학물질농도(kg/kg_{root})

C_{leaf} : 식물 잎조직중 화학물질농도(kg/kg_{leaf})

C_{grass} : 풀 조직중 화학물질농도(kg/kg_{grass})

$K_{plant-water}$: 식물-물 분배율(-)

$C_{soil_2, porew}$: 농지 간극수중 화학물질 농도(kg/m³_{porewater})

RHO_{plant} : 식물조직 밀도(kg_{plant}/m³_{plant})

$BEAT_{leaf}$: 식물 잎조직중의 화학물질 농도에 관한 차분방정식 source항(kg/m³/day)

$BEAT_{grass}$: 풀 조직중 화학물질 농도에 관한 차분방정식 source항(kg/m³/day)

$ALPHA$: 식물체내 화학물질 농도에 관한 차분방정식 sink항(1/day)

$$BETA_{leaf} = C_{soil_2, porew} TSCF \frac{Q_{transp}}{V_{leaf}} + (1 - F_{ass_{aer}}) C_{air} g_{plant} \frac{AREA_{plant}}{V_{leaf}} \dots\dots\dots (22)$$

$$BETA_{grass} = C_{grassland, porew} TSCF \frac{Q_{transp}}{V_{leaf}} + (1 - F_{ass_{aer}}) C_{air} g_{plant} \frac{AREA_{plant}}{V_{leaf}} \dots\dots\dots (23)$$

여기서;

$C_{grassland, porew}$: 草地 간극수중 화학물질 농도(kg/m³_{porewater})

$TSCF$: Transpiration-stram concentration factor (蒸散流根濃縮係數), 식물이 뿌리로 물을 흡수할 때의 식물체내수액과 토양수중 농도비를 나타내는 농축계수

$$TSCF = 0.784 \exp \left[\frac{(-\log Kow - 1.78)^2}{2.44} \right] \dots\dots\dots (24)$$

여기서;

Q_{transp} : 증산류량(m^3/day)

V_{leaf} : 육상부분의 식물 체적(m^3_{plant})

g_{plant} : 전환계수(m/day)

$Area_{plant}$: 식물잎의 표면적(m^2_{plant})

$$\begin{aligned} C_{soil_2, porew} &= C_{grassland, porew} \\ &= C_{soil_2} \frac{RHO_{soil}}{K_{soil-water}} \dots\dots\dots (25) \end{aligned}$$

여기서;

C_{soil_2} : 농지중 화학물질 농도(kg/kg_{soil})

RHO_{soil} : 토양 밀도(kg_{soil}/m^3_{soil})

$$ALPHA = \frac{AREA_{plant} g_{plant}}{K_{leaf-air} V_{leaf}} + k_{eli} + k_{growth} \dots\dots\dots (26)$$

여기서;

$K_{leaf-air}$: 식물잎-대기 분배율(-)

k_{eli} : 식물로부터 화학물질의 총 제거율($1/day$)

k_{growth} : 식물성장에 의한 화학물질의 회석율($1/day$)

1.5.4 육류 및 유제품

$$C_{meat} = BAF_{meat} \sum C_j IC_j \dots\dots\dots (27)$$

$$C_{milk} = BAF_{milk} \sum C_j IC_j \dots\dots\dots (28)$$

여기서;

C_{meat} : 육류중 화학물질 농도(kg/kg_{meat})

C_{milk} : 유제품중 화학물질 농도(kg/kg_{milk})

C : 각 매체중 화학물질 농도(kg/kg_j, kg/m³_{air}, kg/m³_{drw})

IC : 소의 각 매체(풀, 공기, 물 등) 1일섭취량(kg_j/day, kg_{air}/day, kg_{drw}/day)

j : 각매체(grass : 풀, grassland : 초지, air : 공기, drw : 음용수)

BAF_{meat} : 육류의 생물농축계수(day/kg_{meat})

BAF_{milk} : 유제품 생물농축계수(day/kg_{milk})

Travis와 Arms(1988)에 따른 육류와 유제품의 생물농축계수 산정식은 다음과 같다.

$$BAF_{meat} = 10^{-7.6 + \log Kow} \dots\dots\dots (29)$$

(단, $\log Kow \leq 1.5$ 이면 $\log Kow = 1.5$, $\log Kow > 6.5$ 이면 $\log Kow = 6.5$)

$$BAF_{milk} = 10^{-8.1 + \log Kow} \dots\dots\dots (30)$$

(단, $\log Kow \leq 3$ 이면 $\log Kow = 3$, $\log Kow > 6.5$ 이면 $\log Kow = 6.5$)

1.5.5 음료수

$$C_{drw} = \max(C_{water_1} F_{pur}, C_{grw}) \dots\dots\dots (31)$$

여기서;

C_{water_1} : 지표수중 화학물질 농도(kg/m³_{water})

F_{pur} : 상수도 정수율(-)

C_{grw} : 지하수중 화학물질 농도(kg/m³_{water}), $C_{grw} = C_{soil_2, porew}$

1.5.6 인간

환경매체에 분포하는 화학물질은 인간이 섭취하는 어패류, 가축(육류나 유제품), 농작물(곡류, 야채, 과일 등)로 흡수 이동한다. 인간은 오염된 공기를 호흡하거나 토양유입 및 피부접촉을 통하여 환경매체내에 있는 화학물질에 직접 노출되며, 음식물과 음료를 통해 간접적으로 노출된다.

$$DOSE_{total} = \sum DOSE_k = \sum \frac{C_k IH_k}{BW} \dots\dots\dots (32)$$

여기서;

$DOSE$: 각 매체로부터 인간의 화학물질 1일 섭취량(kg/kg_{body}/day)

k : 각 매체(*total*: 전 매체, *drw*: 음료수, *fish*: 어류, *leaf*: 잎, *root*: 식물뿌리, *meat*: 육류, *milk*: 유제품, *air*: 공기)

IH : 인간의 각 매체(공기, 물, 음식 등) 섭취율(kg_j/day, kg_{air}/day, kg_{drw}/day)

BW : 인간의 체중(kg)

1.6 위해성평가 지침치 설정

육상이나 수중에 서식하는 미생물, 조류, 포유류 및 인간에 미치는 독성 등을 입력함으로써 모델에 의한 예측무영향농도(Predicted No Effect Concentration; PNEC)를 추정한다. 포유류, 인간에 관해서는 흡입에 의한 독성을 경구섭취에 의한 독성으로 변환할 수 있으며, 실측치가 존재할 경우는 그 자료를 이용하여 산정한다.

1.6.1 생태계에 미치는 영향

환경에 미치는 영향은 수중이나 육상에 서식하는 생물, 포식동물, 하수처리장의 미생물에 미치는 독성을 나타낸다. 각각에 대한 PNEC는 급성독성 EC50, LC50 및 무영향량 NOEC (No Observed Effect Concentration), NOEL (No Observable Effect Concentration Level)을 근거로 하여 산정한다. 입력할 자료는 독성실험에 의한 것으로, 지구상의 다양한 생물을 특정한 생물이 대표하는 것은 불확실성을 포함하기 때문에 영향이 있다고 판단될 수 있는 최소치를 사용한다. 장기실험 자료의 경우 그 불확실성이 가장 적다고 생각할 수 있다.

1.6.2 인간건강에 미치는 영향

환경으로부터 인간에 미치는 영향과 제품의 사용 소비에 의한 영향에 대해서는 각각의 경우에 따라 독성을 평가한다. 인간의 건강에 미치는 영향에 대해서는 일정량을 섭취하는 것에 의해 나타나는 독성을 고려하는 정량적인 평가와 미

량으로도 영향을 미칠 수 있는 비정량적 평가를 실시한다.

정량적인 평가는 급성, 만성의 독성에 대한 NOEL, NOAEL (No Observed Adverse Effect Level)을 입력 또는 추산하며, 인간에 대해 접근도 NOEL 또는 LOAEL (Lowest Observed Adverse Effect Level)의 값을 근거로 실시한다. 또는 인간의 독성자료가 불충분할 경우 기존에 존재하는 자료로부터 노출경로에 의해 변환 산정하여 부족한 독성자료를 추정하는 것이 가능하다.

1.7 위해성평가

화학물질의 환경중 PEC와 인간이나 자연환경에 대한 PNEC를 비교하는 것에 의해 그 화학물질의 위해성평가(Risk Characterization Ratio; RCR)를 실시한다.

$$RCR = \frac{PEC \text{ (Predicted Environmental Concentration)}}{PNEC \text{ (Predicted No-Effect Concentration)}} \dots\dots\dots (33)$$

1.7.1 생태계 환경

생태계에 미치는 위해성은 생물에 대한 급성독성으로부터 평가를 실시하며, 노출량(또는 농도)과 무영향량으로 부터 수서생물($PEC_{water}/PNEC_{water}$), 저서생물($PEC_{sed}/PNEC_{sed}$), STP중 미생물($PEC_{stp}/PNEC_{micro-organism}$), 포식동물(어류를 포함, $PEC_{oral, fish}/PNEC_{oral}$), 포식동물(지렁이를 포식, $PEC_{oral, worm}/PNEC_{oral}$)의 위해도 평가치를 산출한다.

1.7.2 인간의 건강

인간건강의 정량적인 위해성평가는 환경으로부터 인간에의 노출과 소비에 의한 노출에 대한 안전성(Margins of Safety; MOS)의 계산에 의한다(Table 4).

환경으로부터 영향을 받는 경우, 인간의 노출경로는 흡입(inhalatory), 경구 섭취(oral)이며, MOS는 각 노출경로로부터 인간의 화학물질섭취량과 NOAEL 및 LOAEL을 비교하여 산정한다.

소비에 의한 노출량에 대한 위해성평가는 흡입과 경피(dermal)와 경구로의 노출이 있으며, 사용상태 등 노출의 상세 또는 섭취량 실측치가 필요하며 이 양을 근거로 행해진다.

Table 4. Risk characterization for human's health

Risk characterization	RCR (Exposure / Effects)	Exposure	Available effects data
For Humans Exposed via the Environment	$RCR_{man-env,tot}$	$DOSE_{tot}$	$NOAEL_{man,oral,chr}$ $LOAEL_{man,oral,chr}$
	$RCR_{man-env,inh}$	PEC_{air}	$NOAEL_{ma,inh,chr}$ $LOAEL_{man,inh,chr}$
	Acute $RCR_{cons,inh,acute}$	C_{inh}	$NOAEL_{man,inh,acute}$ $LOAEL_{man,inh,acute}$
	$RCR_{cons,der,acute}$	$U_{der,pot}$	$NOAEL_{man,der,acute}$ $LOAEL_{man,der,acute}$
For Consumers		C_{der}	$NOEC_{man,medium,acute}$ $LOEC_{man,medium,acute}$
	$RCR_{cons,oral,acute}$	I_{oral}	$NOAEL_{man,oral,acute}$ $LOAEL_{man,oral,acute}$
	Chronic $RCR_{cons,inh,chr}$	$C_{inh,ann}$	$NOAEL_{man,inh,chr}$ $LOAEL_{man,inh,chr}$
	$RCR_{cons,der,chr}$	$U_{der,pot}$	$NOAEL_{man,der,chr}$ $LOAEL_{man,der,chr}$
		$C_{der,ann}$	$NOEC_{man,medium,chr}$ $LOEC_{man,medium,chr}$
	$RCR_{cons,oral,chr}$	I_{oral}	$NOAEL_{man,oral,chr}$ $LOAEL_{man,oral,chr}$

$DOSE_{tot}$: 인간의 화학물질 1일 총섭취량(kg/kg_{body}/day)

I_{oral} : 경구를 통한 인간의 화학물질 1일 총섭취량(kg/kg_{body}/day)

$U_{der,pot}$: 피부에 의한 인간의 잠재적 화학물질 1일 총섭취량(kg/kg_{body}/day)

PEC_{air} : 대기중의 화학물질 예측 농도(kg/m³)

C_{inh} : 실내 공기중의 화학물질 농도(kg/m³)

C_{der} : 인간 피부의 화학물질 농도(kg/m³)

$C_{inh,ann}$: 실내 공기중의 화학물질 연평균 농도(kg/m³)

$C_{der,ann}$: 인간의 피부의 화학물질 연평균 농도(kg/m³)

1.8 다매체환경모델과 입력자료 데이터베이스의 연계

수집 또는 수백종의 물질을 동시에 시뮬레이션 가능하도록, 연구대상지역의 특성값 및 화학물질의 배출량 조사결과치, 그리고 옥탄올-물 분배계수, 헨리상수 등의 물질의 특성치의 입력사항을 데이터베이스로 구축하여 MUSEM내부로 연계시킬 수 있도록 하였다.

또한 사용자 선택을 통해 입력 가능하도록 사용자인터페이스를 작성함으로써 모델링을 위한 입력이 용이하도록 하였으며, 화학물질의 모니터링 데이터가 존재하는 경우 모델 예측결과와 비교 가능하도록 실측치자료에 대해서도 데이터베이스화 하였다.

1.8.1 배출량 데이터베이스 구축

본 모델은 화학물질의 배출량 산정의 경우 Fig. 6~7과 같이,

① TRI (한국) 또는 PRTR (일본) 데이터베이스로 부터의 입력

② 화학물질의 제조수량 및 수입수량 데이터베이스로 부터의 입력

③ 생산량, 수입 및 수출량의 직접입력의 형태로 구성하였다. 각각의 데이터베이스는 배출량의 추정에 필요한 데이터를 수집하여 구축할 수 있으며 사용자의 선택에 의해 간단히 모델에 입력 가능하도록 하였다.

1.8.2 화학물질 물성 데이터베이스 구축

화학물질의 분자량, 용해도, 증기압, 녹는점, 끓는점, 옥탄올-물 분배계수, 증발열, 용융열, 분해속도 등의 물성데이터를 수집 데이터베이스에 등록하여 사용할 수 있도록 하였으며, 물성치가 입수 가능한 물질의 자료를 찾아 입력하였다(Fig. 8).

1.8.3 환경 모니터링 데이터베이스 구축

모델에서 계산된 예측농도와 실측자료를 비교할 수 있도록 환경모니터링 데이터베이스를 구축하였으며, 입수 가능한 자료로부터 실측치를 데이터베이스에 입력하였다(Fig. 9).

Microsoft Excel - Microsoft Office Word 2003

Microsoft Access - (PRTR form) フォーム1

PRTR データ (環境省・経済産業省, 2003)

製造数量及び輸入数量 (合計, 経済産業省告示)

生産量, 輸入及び輸出入の直接入力

物質名: 2, 4-ジニトロロ
生産量: [kg・d⁻¹]
輸入量: [kg・d⁻¹]
輸出入: [kg・d⁻¹]
主業種:
主用途:

詳細区分 I:
詳細区分 II:
詳細区分 III: 産業工程別
①生産工程
②製造工程
③加工工程

対象地域から環境中への化学物質排注
DIRECT EMISSIONS
地域: 東京都
大気
淡水域
陸水域
土壌域
下水処理場流入

EMISSIONS VIA SEWAGE TREATMENT

リスク評価数値モデルの入力値算定のための
PRTR (Pollutant Release and Transfer Registers) データベース
Copyright (c) 2003 Research Center for Environmental Risk, NIES

ERTR No. (CAS No.): 11 | アセトアルデヒド
Regional area: 13 | 東京都

届出・届出外総排出量 (kg/年)

	計	大気	陸水域	海域	土壌	STPへ
Region	615,621.6	615,478.6	51.8	91.2	0.0	
Continent	8,982,033.6	8,913,372.3	24,877.5	43,783.8	0.0	
計	9,597,655.3	9,528,850.9	24,929.3	43,875.1	0.0	

詳細

1. 届出排出量・移動量 (集計値, kg/年)

	計	大気	陸水域	海域	土壌	STPへ
Region	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
Continent	187,004.0	119,633.0	24,410.0	42,961.0	0.0	
計	187,004.0	119,633.0	24,410.0	42,961.0	0.0	
比率 (%)	100.00	63.97	13.05	22.97	0.00	

都道府県別の届出排出量・移動量 (集計値, kg/年)

	計	大気	陸水域	海域	土壌	STPへ
1. 北海道	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
2. 青森県	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
3. 岩手県	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
4. 宮城県	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
5. 秋田県	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	

フォームビュー

Fig. 6. Chemical emission volume database from TRI or PRTR data.

化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律に基づき、製造数量及び輸入数量

指定化学物質番号 (通し番号)
198 129188-99-4 4, 4' - (3, 5-トリメチルシクロヘキシル) ジフェノール

指定化学物質の名称
4, 4' - (3, 5-トリメチルシクロヘキシル) ジフェノール

CAS No.
129188-99-4

PRTR 番号
198

指定化学物質番号 (通し番号)
198

有害化学物質のリスク評価数値モデル入力

2001年度 2,203 ton/yr

リスク評価数値モデルへの入力決定窓を開く。

モデルに入力する値を選んで下さい!

日本全国データ
製造数量及び輸入数量を合計した数量 (単位: トン)

1988~現在までの平均値 1,441

年度別	1988	1989	1990	1991	1992	1993	1994	1995	1996	1997	1998	1999	2000	2001
	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,377	904	1,779	940	2,203

段階 回収段階

Fig. 7. Chemical emission volume database from products and imports.

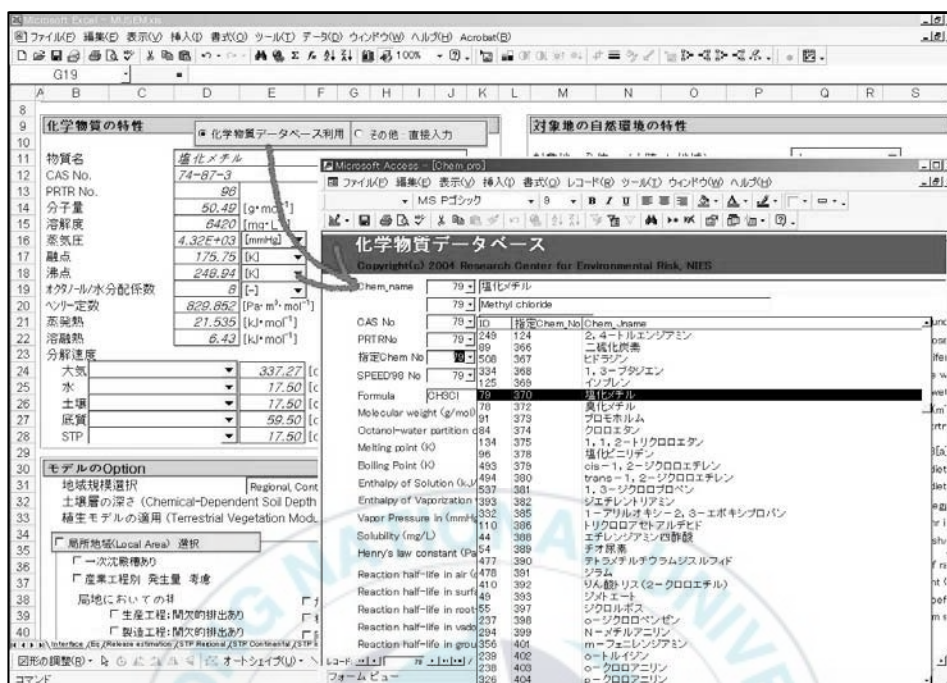


Fig. 8. Database of physico-chemical properties.

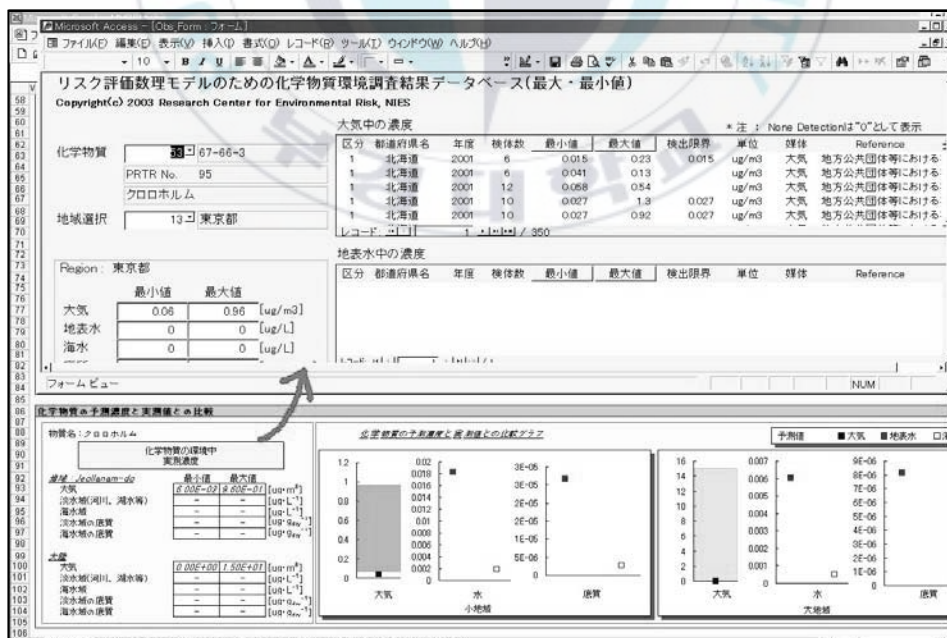


Fig. 9. Database of environmental monitoring data.

1.8.4 대상지역 일반현황 데이터베이스 구축

각 지역에 대하여 지자체별 토지(자연지, 농지, 도시) 및 수역(하천, 호소, 해역), 저질(하천, 호소, 해역)의 면적과 인구, 하수도 등의 데이터베이스를 구축할 수 있게 하였으며, 입수 가능한 자료를 입력하였다(Fig. 10).

The screenshot shows the MUSEM.xls spreadsheet with the following sections:

- Chemical Substance Characteristics (Left):**
 - Chemical Name: **クロロホルム (別名: トリクロロメタン)**
 - CAS No.: **67-68-3**
 - PRTR No.: **95**
 - Molecular Weight: **119.39 [g·mol⁻¹]**
 - Boiling Point: **79.70 [°C]**
 - Vapor Pressure: **2.09E+02 [mmHg]**
 - Melting Point: **208.65 [°C]**
 - Boiling Point: **334.3 [°C]**
 - Octanol/Water Partition Coefficient: **90 [-]**
 - Henry's Law Constant: **433.671 [Pa·m³·mol⁻¹]**
 - Heat of Vaporization: **28.24 [kJ·mol⁻¹]**
 - Heat of Fusion: **8.8 [kJ·mol⁻¹]**
 - Decomposition Rate: **143.00 [d]**
 - Water: **104.00 [d]**
 - Soil: **60.99 [d]**
 - Bottom: **93.50 [d]**
 - STP: **104.00 [d]**
- Model Options (Bottom Left):**
 - Regional Scale Selection: **Regional, Continental, Global Scale**
 - Soil Depth (Chemical-Dependent Soil Depth): **[NO]**
 - Terrestrial Vegetation Module: **[NO]**
 - Local Area (Local Area) Selection: **[]**
 - Primary Production: **[]**
 - Industrial Process: **[]**
 - Production Process: **[]**
 - Manufacturing Process: **[]**
- Object Area Natural Environment Characteristics (Right):**
 - Object Area: **Japan**
 - Population: **1.27E+08 [eq]**
 - Land Area: **3.78E+05 [km²]**
 - Land Use:
 - Natural: **0.887 [-]**
 - Agriculture: **0.132 [-]**
 - Urban/Industrial: **0.178 [-]**
 - Water (River, Lake, etc.): **0.029 [-]**
 - Sea Area (Land Area Multiple): **1 [倍]**
 - Underground Water: **0.620 [-]**
 - Land Use (Land Area Multiple): **1.15E+08 [eq]**
 - Population: **1.22E+07 [eq]**
 - Land Area: **2.10E+05 [km²]**
 - Land Use:
 - Natural: **0.367 [-]**
 - Agriculture: **0.043 [-]**
 - Urban/Industrial: **0.558 [-]**
 - Water (River, Lake, etc.): **0.032 [-]**
 - Sea Area (Land Area Multiple): **1 [倍]**
 - Underground Water: **0.700 [-]**

Fig. 10. Selection of environmental scale on database of characteristics of Regional area.

2. 순위결정을 위한 부분순서이론

2.1 부분순서이론

선형대수의 간단한 순위결정 기법인 부분순서이론(Partial Order Theory; POT)은 Halfon과 Reggiani (1986)에 의해 화학물질관리를 위해 도입되었으며, 위해성평가를 위한 화학물질의 우선순위는 POT와 Hasse diagram 이론으로 평가할 수 있다 하였다. 이때의 POT는 인간과 생태계 환경에 부정적 영향을 미치는 화학물질을 상위 순위로 하고 있다(Halfon and Reggiani, 1986; Brüggemann and Halfon, 1990; Brüggemann and Münzer, 1993; Klein et al., 1995; Galassi et al., 1996; Halfon et al., 1996; Sørensen et al., 1998; Behrendt et al., 1999; Brüggemann and Bartel, 1999; Brüggemann et al., 1999; Lerche et al., 2002a; Lerche et al., 2004).

POT는 수학의 한 교과로 집합, 격자, 그래프이론, 순열 등의 분야에서 쉽게 접할 수 있다 (Birkhoff, 1984; Davey and Priestley, 1990; Bartel, 1996). POT의 기본적인 개념에 대해서는 Halfon과 Reggiani (1986), Brüggemann와 Bartel (1999), Brüggemann 등(1999), Brüggemann 등(2001)에 잘 나타나 있다.

POT는 수학적관계인 대소 관계 " $\leq$ " 만을 고려하는 간단한 순위결정법이다 (Davey and Priestley, 1990). POT는 정량적 계량법이 아니므로 순위에 따른 화학물질간 영향력의 크기가 정량적으로 표현되지는 않는다.

예로 인체중의 화학물질농도와 같이 대상매체중 한 그룹의 물질을 고려할 때, 이는 descriptors (q_j)로 나타낼 수 있다. 이때의 대상매체중의 화학물질 x_1 은 descriptors $q_j(x_1)$ 으로 표현하며, 또 다른 물질 x_2 는 descriptors $q_j(x_2)$ 로 표현가능하다. 화학물질 x_1 과 x_2 는 각각의 개별 descriptor내에서 우선순위 비교가 가능하다. 비교결과, 물질 x_1 의 모든 descriptor가 물질 x_2 의 descriptor보다 상위이거나 같은 순위를 차지한다면 결과적으로 물질 x_1 은 물질 x_2 보다 상위의 우선순위나 동등한 순위를 가질 것이다. 이는 수학적으로 $x_2 \leq x_1$ if $q_j(x_2) \leq q_j(x_1)$ for all j로 표현된다.

물론 특정한 경우 x_1 의 모든 descriptor가 x_2 의 descriptor와 같은 순위라면, 모든 j에서 $q_j(x_1)=q_j(x_2)$ 이며 이 둘은 동등한 순위를 차지할 것이다. 이를 수학적

으로 표현한다면 $x_1 \leq x_2$ and $x_1 \geq x_2 \Leftrightarrow x_1 \sim x_2$ 이다. 나아가 $x_2 \leq x_1$ 이고 $x_3 \leq x_2$ 이면 $x_3 \leq x_1$ 이다. 반면, descriptor (q_1)은 $x_2 \leq x_1$ 이고 descriptor (q_2)에서는 $x_1 \leq x_2$ 의 경우에서처럼 두 가지 화합물질의 순위를 결정할 수 없다면 이는 비교불가능(incomparability)이라 표현한다.

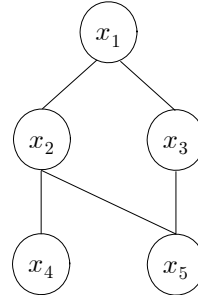
POT는 각 화합물질 사이의 관계를 선으로 연결하여 나타낸 Hasse diagram (Hasse, 1952)과 linear extension (LE)을 이용하여 나타낸다. 간단한 Hasse diagram의 원리를 표현하고자 Fig. 11에서 임의의 화합물질 5종(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5)과 두가지의 descriptors (q_1, q_2)를 이용하였다. x_1 은 Fig. 11의 Step 1과 같이 두가지 descriptor에서 $q_1(x_1)=5$ 와 $q_2(x_1)=5$ 로, 다른 모든 화합물질보다 높은 순위를 차지하였다($q_1(x_1) \geq q_1(x_{all})$ 와 $q_2(x_1) \geq q_2(x_{all})$, 여기서 x_{all} 는 모든 물질). Fig. 11에서 물질 x_2 와 x_3 는 descriptor (q_1)에서 x_2 가 x_3 보다 크며($q_1(x_2)=4 > q_1(x_3)=2$) 반대로 두 번째 descriptor (q_2)에서는 x_3 가 x_2 보다 큰 것으로 나타나($q_2(x_3)=4 > q_2(x_2)=3$), 이 둘의 순위는 결정할 수 없다(incomparability).

이를 Hasse diagram을 이용하여 관략히 순위관계를 나타내면 Fig. 11의 Step 2와 같다. POT내에서 등위관계에 관한 보다 상세한 설명은 Brüggemann과 Bartel (1999)에 잘 나타나 있다.

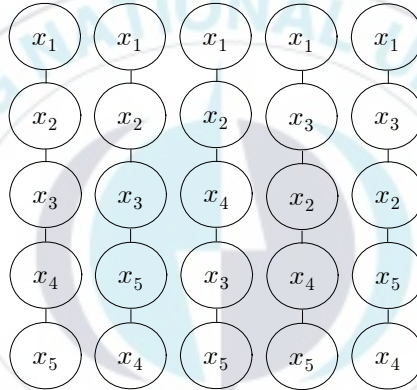
Step 1 : Data matrix;
Five substances (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5)
and two descriptors (q_1, q_2)

Objects	q_1	q_2
x_1	5	5
x_2	4	3
x_3	2	4
x_4	3	1
x_5	1	2

Step 2 :
Hasse diagram



Step 3 : All linear extensions



Step 4 :
Occurrence of ranks

Rank	Object				
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
5	5	0	0	0	0
4	0	3	2	0	0
3	0	2	2	1	0
2	0	0	1	2	2
1	0	0	0	2	3

Step 5 :
Ranking frequencies or
ranking probabilities

Rank	Object				
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
5	1	0	0	0	0
4	0	0.6	0.4	0	0
3	0	0.4	0.4	0.2	0
2	0	0	0.2	0.4	0.4
1	0	0	0	0.4	0.6
Avg.	5	3.6	3.2	1.8	1.4

Fig. 11. An example of a Hasse diagram, the calculation of the ordinal ranking probabilities and the average rank (Lerche et al., 2002a; Lerche et al., 2003; Lerche et al., 2004).

2.2 Hasse 다이어그램

Hasse diagram은 순서 관계를 방향 그래프로 표현하면 복잡하여 한눈에 파악하기 힘들기 때문에 독일의 수학자 Hasse (1952)가 관계를 간결하고 명확하게 표현하기 위해 고안한 것으로 모든 화살표는 위에서 아래로 향한다고 가정하여 생략하며, $x_1 > x_2$ 이면 x_1 을 x_2 보다 위에 그린 그래프이다(Table 5, Fig. 12).

Halfon과 Reggiani (1986)는 Table 5와 같이 6종의 화학물질에 대하여, 7가지의 descriptor (생물농축과 분해 특성)를 이용하여 우선순위를 평가하였으며, 이때의 각 물질간의 순위관계는 Fig. 12의 (b)와 같다. 또한 hexachlorobenzene > biphenyl > benzoic acid의 순으로 나타나는 3종의 화학물질의 경우 Fig. 12의 (c)에서처럼 hexachlorobenzene와 benzoic acid의 순위관계를 나타내는 화살표는 생략할 수 있으며, 이는 Fig. 12의 (d)와 같이 상위순위를 차지하는 물질을 다른 물질보다 위에 그림으로서 Hasse diagram으로 간략화 할 수 있다. Hasse diagram은 Fig. 12의 (d)와 같이 물질들의 level로 구성되며, 이는 환경영향의 순위를 나타낸다(Brüggemann and Steinberg, 2000; Brüggemann et al., 2002).

Table 5. Vector distance components^a (Halfon and Reggiani, 1986)

	Accumulation				Degradation (inverse)		
	algae BF ₁ (1)	fish BF ₂ (2)	rat % retention (3)	act. sludge BF ₅ (4)	act. sludge % CO ₂ (5)	photoirradiation	
No Compound						% CO ₂ ×10 ⁻⁵ (6)	% org fragments (7)
1 toluene	380	94	0.1	1900	3802×10 ⁻⁵	11900	10.0
6 benzoic acid	6	5.1	0.1	1300	1529×10 ⁻⁵	9804	10.0
23 biphenyl	540	280	0.4	2600	6579×10 ⁻⁵	10500	10.0
24 2,2'-dichlorobiphenyl	2690	2420	0.1	6300	10.0	28600	10.0
28 2,4,6,2',4'-pentachlorobiphenyl	11500	2320	39.8	27800	3.33	19200	10.0
34 hexachlorobenzene	24800	2600	55.7	35000	10.0	66700	10.0

^aThe first four columns are the relative bioaccumulation rates of benzene derivatives, benzoic acid derivatives, aniline derivatives, and phenol derivatives. The last three columns are the inverse of the degradation rates. Inverse because higher values of degradation are preferable while high bioaccumulation is not. The ranking direction must be the same in absolute terms.

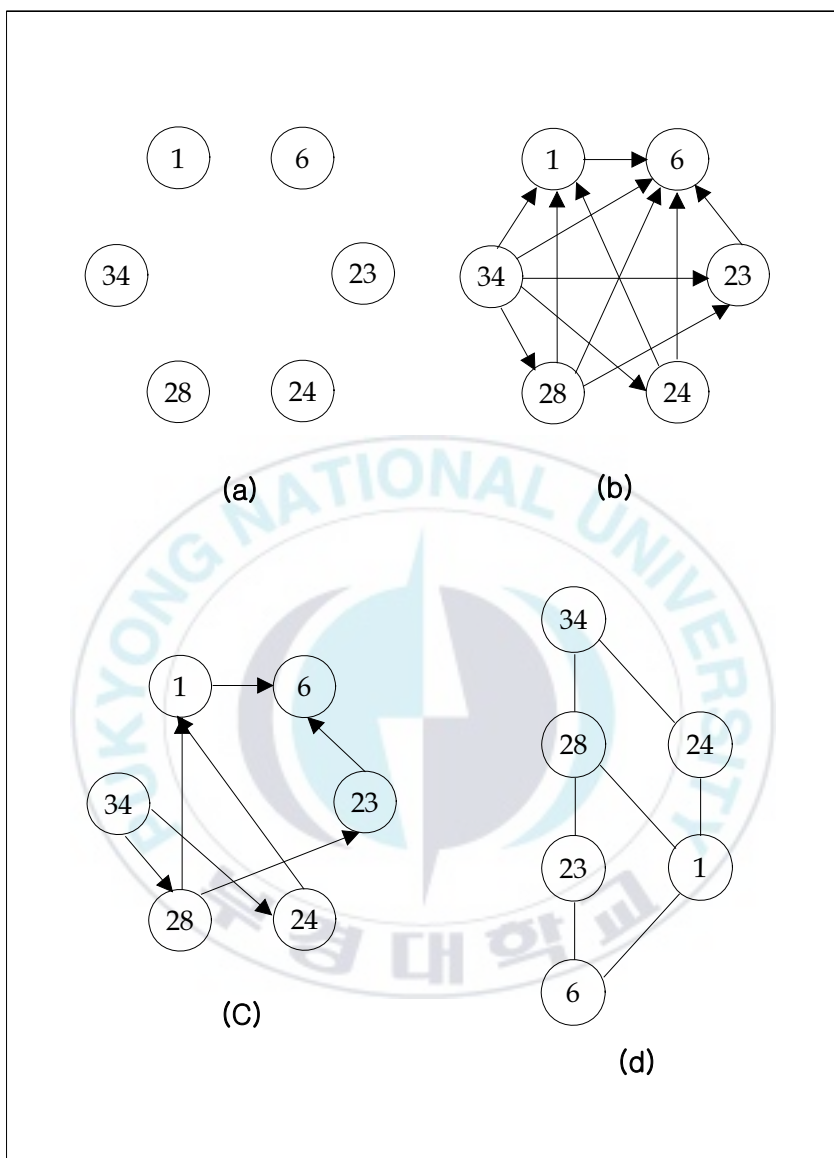


Fig. 12. Formal procedure to rank chemicals according to environmental hazard is explained by using six chemicals from Table 4. (a) Set chemicals at vertices of regular polygon, (b) rank chemical with one another, (c) remove redundant lines, and (d) rotate diagram and eliminate arrows, i.e., Hasse diagram (Halfon and Reggiani, 1986).

2.3 선형확장과 순위확률

Linear extension (LE)은 POT에서 행해질 수 있는 모든 순서를 나타내는 것이다(Davey and Priestley, 1990). Fig. 11의 Step 2와 같이 순위가 불명확한 Hasse diagram은 전 화학물질의 순위를 표현하기 위해, Step 3과 같은 여러 개의 선형적 순서로 다시 구성함으로써 표현 가능한 모든 선형의 순서를 찾아낸다.

가능한 모든 선형순서가 구해졌을 때 한 물질 (i)이 차지한 순위 (k)를 모두 구한 Occurrence of ranks (Fig. 11의 Step 4)를 이용, 각 개별 화학물질에 대한 Ranking probability (pr)를 구할 수 있으며, 순위에 관련된 모든 개체의 raking probability를 고려하여 대상 물질의 average ranking을 구할 수 있다(Graham, 1982; Winkler, 1982; Winkler, 1983). average ranking은 다음의 수식과 같이 물질 (i)의 각 순위 (k)와 그것의 ranking probability (pr)의 곱의 모든 합으로 구한다.

$$\text{Average Ranking}(i) = \sum_{k=1}^{k=N} k \cdot pr(i,k) \quad \dots\dots\dots (34)$$

여기서 N 은 물질의 개수이다.

이러한 원리는 Fig. 11에 Step 4와 Step 5에 잘 나타나 있다. 물질 x_1 은 모든 LE에서 상위에 위치하기 때문에 가장 높은 순위를 차지한다. 반면, 물질 x_3 는 LE에서 4(2회), 3(2회), 2(1회)의 값을 차지하였으므로, ranking probability는 0.32이며 랭킹 3위를 차지하였다(Fig. 13). Fig. 11에서 주어진 예에서 5종의 화학물질의 경우 average ranking은 x_1 (5) > x_2 (3.6) > x_3 (3.2) > x_4 (1.8) > x_5 (1.4)이다.

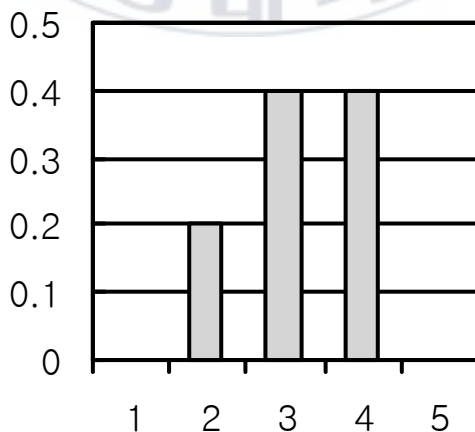


Fig. 13. Ranking probability for x_3 from Fig. 11.

III. MUSEM의 적용성

화학물질의 위해성평가를 위해 개발된 다매체모델 MUSEM은 화학물질이 제조 사용되는 과정에서 인간이나 동물을 포함한 생태계 중에 어느 정도의 양이나 농도로 존재하는가를 예측 가능하다. 또한 MUSEM내의 입력인자(면적과 같은 대상지역 특성, 화학물질 배출량, 옥탄올-물 분배계수, 헨리상수 등)를 데이터베이스로 작성하여 사용자가 선택에 따라 간단히 입력이 가능하도록 유저인터페이스를 구성함으로써 모델링 수행이 편리하도록 구성하였다.

본 장에서는 MUSEM의 적용성을 살펴보고자, 우선적으로 각 환경매체중의 화학물질 실측치 농도와 모델에 의한 추정치의 비교와 민감도 분석을 실시하였으며, 다음으로 인간의 1일 화학물질 섭취량을 추정하였다.

1. 실측치와 비교평가 및 민감도 분석

다매체환경중 화학물질거동을 예측하기 위해, 일본지역에서 배출량이 알려져 있는 물질 62종을 중심으로 각 매체중의 화학물질 농도를 예측하였다. 추정된 화학물질 농도는 실측치와 비교·분석하였으며, 민감도 분석을 실시하여 모델링결과의 타당성을 검토하였다. 이때 모델링을 위한 대상연구지역 및 입력자료는 Table 6과 같다.

Table 6. Input data of environmental characteristics for calibration and sensitivity analysis in MUSEM

Regional area	47 Prefectures of Japan
Continental area	Japan except Regional area
Substances	62 chemicals substances (Type II Monitoring chemical substances in Japan)
Emission load	Emission database by PRTR result

1.1 모델입력자료 산정

1.1.1 대상지역 선정

일본에서 배출되고 있는 화학물질의 영향을 파악하고자 한 물질당 일본의 전 행정구역 47개의 도도부현(都道府縣)을 모두 Regional area로 설정하였으며, 이때 선택된 Regional area를 제외한 나머지의 일본전국토를 Continental area로 하여 모델링을 실시하여 그 결과를 상호비교 평가하였다.

지역DB의 일반현황은 Table 7과 같으며, 일본 각 행정구역별 인구수는 日本總務省統計局(2002) 자료를 이용하였으며, 각 지역별 면적 및 토양별 비율은 日本總務省統計局(2002)과 日本總務省統計局(2001)자료를 바탕으로 산정하였다. 각 대상지역의 면적 및 토지 비율은 대기, 물, 토양, 저질 등의 환경매체들의 체적을 구하는데 이용된다. 하수처리장 규모를 산정하기위한 하수도 보급률은 日本水道産業新聞社(2002)의 자료를 이용하였다. Continental area의 인구수 및 면적은 일본전국의 값에서 Regional area의 규모를 제외한 값으로 하였으며, 하수처리장규모를 산정하기위한 하수도 보급률은 일본전국의 값을 적용하였다.

Table 7. Input data of regional characteristics in Japan for calibration and sensitivity analysis in MUSEM

Area code	Area name	Population (×1000)	Area (km ²)	Area ratio(%)				Sewage supply (%)
				forest	agri. area	urban·Ind. area	surface water area	
	Japan (Whole country)	127,432	377,880	66.1	13.2	17.80	2.90	62
1	Hokkaido	5,670	83,454	68.3	15.2	14.18	2.32	82
2	Aomori-ken	1,469	9,235	64.9	17.1	15.43	2.57	40
3	Iwate-ken	1,407	15,279	75.4	10.8	12.56	1.24	35
4	Miyagi-ken	2,371	6,862	56.9	19.7	20.26	3.14	65
5	Akita-ken	1,176	11,434	70.8	13.4	13.07	2.73	37
6	Yamagata-ken	1,235	7,394	69.1	13.9	14.93	2.07	50
7	Fukushima-ken	2,120	13,783	68.6	11.7	17.12	2.58	33
8	Inaraki-ken	2,990	6,096	32.0	30.4	30.20	7.40	43
9	Tochigi-ken	2,010	6,408	54.7	21.0	20.96	3.34	46
10	Gumma-ken	2,032	6,363	64.1	13.5	20.18	2.22	37
11	Saitama-ken	7,001	3,767	33.1	23.4	37.94	5.56	67
12	Chiba-ken	5,994	4,996	32.6	27.3	36.80	3.30	57

Table 7. Input data of regional characteristics in Japan for calibration and sensitivity analysis in MUSEM (*continued*)

Area code	Area name	Population (×1000)	Area (km ²)	Area ratio(%)				Sewage supply (%)
				forest	agri. area	urban·Ind. area	surface water area	
13	Tokyo-to	12,219	2,102	36.7	4.3	55.84	3.16	97
14	Kanagawa-ken	8,625	2,415	40.3	9.2	47.52	2.98	92
15	Niigata-ken	2,465	10,939	62.5	14.6	20.30	2.60	41
16	Toyama-ken	1,119	2,802	56.5	14.7	25.46	3.34	45
17	Ishikawa-ken	1,180	4,185	66.4	11.3	20.65	1.65	59
18	Fukui-ken	828	4,189	74.4	10.4	12.96	2.24	57
19	Yamanashi-ken	889	4,201	77.8	6.3	13.44	2.46	55
20	Nagano-ken	2,217	12,598	75.0	8.9	14.43	1.67	56
21	Gifu-ken	2,111	10,209	80.0	5.8	12.06	2.14	49
22	Shizuoka-ken	3,786	7,329	63.7	10.3	22.22	3.78	44
23	Aichi-ken	7,123	5,118	43.5	16.9	36.06	3.54	56
24	Mie-ken	1,861	5,761	65.6	11.6	19.67	3.13	26
25	Shiga-ken	1,359	3,855	50.9	14.2	15.83	19.07	64
26	Kyoto-fu	2,642	4,613	75.2	7.4	15.58	1.82	81
27	Osaka-fu	8,815	1,893	31.4	8.5	55.87	4.23	83
28	Hyogo-ken	5,578	8,392	68.1	9.8	19.82	2.28	82
29	Nara-ken	1,438	3,691	77.2	6.7	14.07	2.03	59
30	Wakayama-ken	1,061	4,726	77.0	8.0	12.63	2.37	10
31	Tottori-ken	612	3,507	74.2	11.1	12.65	2.05	43
32	Shimane-ken	757	6,707	78.9	6.4	11.17	3.53	25
33	Okayama-ken	1,953	7,009	68.4	10.7	18.54	2.36	39
34	Hiroshima-ken	2,878	8,477	73.2	7.7	17.78	1.32	57
35	Yamaguchi-ken	1,518	6,111	71.3	9.1	18.22	1.38	47
36	Tokushima-ken	820	4,145	75.4	8.6	12.89	3.11	11
37	Kagawa-ken	1,021	1,862	47.6	19.1	30.15	3.15	28
38	Ehime-ken	1,486	5,676	70.5	11.1	17.18	1.22	36
39	Kochi-ken	810	7,105	83.4	4.3	10.53	1.77	23
40	Fukuoka-ken	5,043	4,840	44.9	19.3	32.90	2.90	64
41	Saga-ken	874	2,439	44.4	24.3	28.76	2.54	26
42	Nagasaki-ken	1,507	4,093	59.0	13.4	26.94	0.66	42
43	Kumamoto-ken	1,858	6,908	62.9	17.4	18.20	1.50	46
44	Oita-ken	1,219	5,804	71.0	10.3	17.22	1.48	34
45	Miyazaki-ken	1,167	6,685	75.9	9.4	12.81	1.89	37
46	Kagoshima-ken	1,779	9,132	63.6	14.3	21.02	1.08	33
47	Okinawa-ken	1,339	2,272	47.2	18.8	-	-	56

1.1.2 대상물질 선정

일본은 Fig. 14와 같이 화학물질 심사 및 제조 등의 규제에 관한 법률(化審法; The Law concerning Examination and Regulation of Manufacture, etc. of Chemical Substances)에 의해 제1종특정화학물질, 제2종특정화학물질, 제1종감시화학물질, 제2종감시화학물질, 제3종감시화학물질 등으로 구분하여 유해성평가에 따라 화학물질을 관리하고 있으며, 이들 목록에 등재되지 않은 물질중에서도 소량면제 대상(연 전국기준 1톤 미만)이나 농약, 의약품 등을 제외한 물질은 유해성 심사대상이 된다(Ministry of economy, trade and industry of Japan et al., 2003).

이 법은 난분해성이며, 인간의 건강이나 동식물의 생육장에 등 악영향을 미칠 우려가 있는 화학물질로부터 환경오염을 방지하기 위해, 신규화학물질 또는 기존화학물질 등이 제조 수입되기 이전에 그 물질의 상태(분해성, 농축성, 인간에 미치는 독성, 생태독성 등)에 관해 심사하는 제도로써 그에 상응하는 화학물질의 제조 및 수입, 사용 등의 규제를 목적으로 제정되었다.

제1종특정화학물질의 경우, 난분해성, 고농축성이며, 인간을 포함한 고차포식 동물에게 장기독성을 미칠 가능성이 있는 화학물질로 PCB, DDT 등이 지정되어 있으며, 사실상 제조 수입 등이 금지대상인 것과 같이 일본은 PCB와 같은 난분해성이면서 생물농축성이 높은 물질을 중점관리하고 있으며, 이러한 종류의 물질로서 인간에 유해의 우려가 큰 물질의 사용금지나 사용제한에 법의 초점을 두고 있다. 일본은 화학물질 자체의 유해성보다는 화학물질이 환경을 통해 인간에 악영향을 줄 가능성이 있는지를 중점적으로 검토하고 있다.

신규물질의 경우 제1종특정화학물질로 될 가능성이 있는 물질은 도중에 제조, 수입을 포기하기 때문에, 지금까지 이 과정에서 선정된 경우는 없으며, 잠정적으로나마 심사단계에서 규제대상이 되는 물질은 제2종감시화학물질(2003년 개정 이전의 지정화학물질)이라 할 수 있다. screening 독성시험 결과, 만성독성이 우려되거나 유전독성이 우려되는 난분해성, 생물농축 가능성 물질이 해당된다. 제2종감시화학물질로 판정될 경우 제조·수입량을 보고 받아, 이를 토대로 환경모니터링 대상물질을 선정한다. 그 결과 환경중 상당량 잔류하는 것으로 판정되는 경우, 제2종특정화학물질로 지정되게 된다.

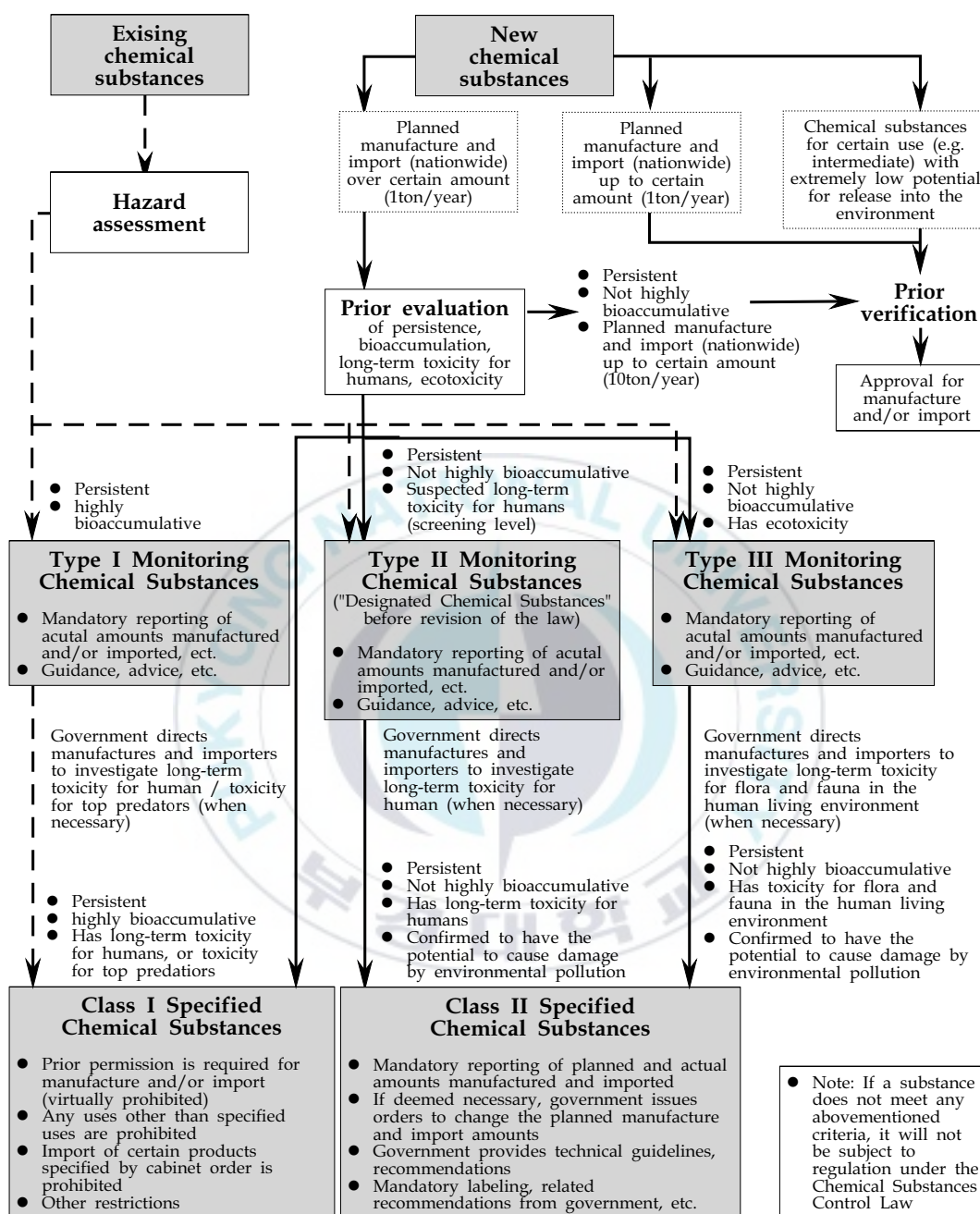


Fig. 14. Framework for evaluation and regulation of chemical substances in Japan under amended Chemical Substances Control law (Ministry of Economy, Trade and Industry of Japan et al., 2003).

본 연구에서는, chloroform 등이 지정되어 있는 고농축성은 없지만, 난분해성으로 인간에게 장기독성의 우려가 있는 화학물질인 제2종감시화학물질을 대상으로 모델링 수행을 하고자 한다. 따라서, 제2종감시화학물질중 물성치가 알려져 있으며, 배출량 산정을 위해 일본의 PRTR데이터가 활용가능한 62종을 대상으로 MUSEM을 이용하여 환경매체중의 농도를 추정하며, 분자량, 용해점, 끓는점, 증기압, 용해도, 옥탄올-물 분배계수 등의 각 화학물질의 물성치를 MUSEM의 입력자료로 사용하였다(Table 8).

1.1.3 화학물질 배출량 산정

실측치비교와 민감도 분석을 위한 대상물질의 배출량은 일본의 화학물질 배출·이동량 신고제도(PRTR; The Japanese Pollutant Release and Transfer Register)의 배출량조사결과 데이터(日本環境省・經濟産業省, 2003; 日本環境省, 2003)를 활용하여 산정하였다.

일본에서는 1999년에 PRTR 제도가 법제화되어, 화학물질 배출량에 관한 2002년도의 정보가 처음으로 공개되었다. 이 PRTR 제도는 종래의 한정된 개별물질 배출농도규제에서 탈피하여, 과학적인 데이터가 불충분하더라도 인간과 야생생물에 악영향을 미치는 것으로 우려되는 유해화학물질을 대상으로 하여 이들 물질의 연간 배출량 등의 정보를 행정 및 사업자뿐만 아니라 일반 국민과 함께 공유함으로써 국가 전체적으로 자체적인 화학물질관리를 촉진해 나가기 위한 새로운 제도이다.

PRTR 정보에 의해 다수의 유해화학물질이 각 발생원에서 대기, 수역, 토양 등으로의 배출되는 양 및 폐기물로서의 이동량 등의 전체상 및 발생원별 기여율과 배출처 비율을 파악할 수 있으므로, 어떤 물질 혹은 어떤 지역의 각 발생원 및 각 환경매체 전체를 고려한 종합적인 안전관리가 가능하게 된다.

일본 PRTR 제도에는 인간과 생태계에 유해한 영향을 미칠 우려가 있는 354개 물질이 신고대상으로 포함된다. 또 전국의 약 100만개 사업소 가운데, 제조업 외에도 종업원 수가 21인 이상인 사업자 가운데 대상화학물질의 연간취급량이 1톤 이상인 약 3만 5,000개 사업소가 신고의무를 가진다.

Table 8. Input data of physico-chemical properties for calibration and sensitivity analysis in MUSEM

Compound Name	No	CAS No	PRTR No	Molecular weight (g/mol)	Fusion point (°C)	Boiling point (°C)	Vapor pressure (mmHg)	Solubility (mg/L)	Octanol-water partition coefficient (logPow)
p-chloronitrobenzene	1	100-00-5	237	157.56	85	338.15	0.0219	225	2.39
p-nitroaniline	2	100-01-6	234	138.13	147.65	420.8	3.2E-06	728	1.39
4-ethenylcyclohexene	3	100-40-3	255	108.18	-61.89	211.26	15.7	50	3.93
methylaniline	4	100-61-8	323	107.16	-57	216.15	0.453	5620	1.66
2-vinylpyridine	5	100-69-6	256	105.14	-15.16	257.99	2.78	27500	1.54
moca	6	101-14-4	120	267.16	110	383.15	2.86E-07	13.9	3.91
p-chloroaniline	7	106-47-8	72	127.57	72.65	345.8	0.027	3900	1.83
allylglycidylether	8	106-92-3	23	114.15	-44.51	228.64	4.3	43260	0.45
1,3-butadiene	9	106-99-0	268	54.09	-108.75	164.4	2110	735	1.99
ethylidenedichloride	10	107-06-2	116	98.96	-35.31	237.84	78.9	8600	1.48
m-phenylenediamine	11	108-45-2	264	108.14	66.1	339.25	0.00209	238000	-0.33
cyanuricchloride	12	108-77-0	212	184.41	154	427.15	0.023	401	1.73
piperazine	13	110-85-0	258	86.14	106	379.15	0.16	1000000	-1.5
diethylenetriamine	14	111-40-0	17	103.17	-39	234.15	0.232	1000000	-2.13
TCEP	15	115-96-8	352	285.49	-35	238.15	0.0613	7000	1.44
decabromodiphenyl ether	16	1163-19-5	197	959.17	295	568.15	4.67E-12	0.0001	12.11
2,6-dichlorobenzonitrile	17	1194-65-6	143	172.01	144.2	417.35	0.00101	21.2	2.74
3,3'-dimethylbenzidine	18	119-93-7	171	212.3	131.5	404.65	6.92E-07	1300	2.34
fenitrothion	19	122-14-5	192	277.24	-273	0.15	0.000054	38	3.3
simazine	20	122-34-9	90	201.66	226.15	499.3	2.21E-08	6.2	2.18

Table 8. Input data of physico-chemical properties for calibration and sensitivity analysis in MUSEM (*continued*)

Compound Name	No	CAS No	PRTR No	Molecular weight (g/mol)	Fusion point (°C)	Boiling point (°C)	Vapor pressure (mmHg)	Solubility (mg/L)	Octanol-water partition coefficient (logPow)
1,4-dioxane	21	123-91-1	113	88.11	11.95	285.1	38.1	100000	-0.27
tri-n-butyl phosphate	22	126-73-8	354	266.32	-79	194.15	0.00113	280	4
tetramethylthiuram disulfide	23	137-26-8	204	240.43	155.75	428.9	1.73E-05	30	1.73
ziram	24	137-30-4	249	305.8	250	523.15	7.5E-09	65	1.23
p-phenetidine	25	156-43-4	265	137.18	2.4	275.55	0.0105	7510	1.24
cis-1,2-dichloroethylene	26	156-59-2	118	96.94	-80.35	192.8	200	6410	1.86
trans-1,2-dichloroethylene	27	156-60-5	119	96.94	-49.65	223.5	331	4520	2.09
tetrachloroisophthalonitrile	28	1897-45-6	199	265.91	250	523.15	5.7E-07	0.6	3.05
EPN	29	2104-64-5	37	323.31	35.2	308.35	9.5E-07	3.11	4.78
dinitrotoluene	30	25321-14-6	157	546.41	60	333.15	0.000397	270	2.18
hydrazine	31	302-01-2	253	32.05	2.15	275.3	14.4	100000	-2.07
linuron	32	330-54-1	129	233.1	158.15	431.3	6.9E-08	42	2.68
diazinon	33	333-41-5	185	304.35	120.15	393.3	9.01E-05	40	3.81
BPMC	34	3766-81-2	330	207.27	31.5	304.65	0.000143	420	2.78
1,3-dichloropropene	35	542-75-6	137	110.97	-83.85	189.3	34	2800	2.04
ethylenediaminetetraacetic acid	36	60-00-4	47	292.25	245	518.15	4.98E-13	1000	-3.86
dimethoate	37	60-51-5	156	229.26	52.15	325.3	8.25E-06	25000	0.78
amitrole	38	61-82-5	19	84.08	159	432.15	4.4E-07	280000	-0.86
thiourea	39	62-56-6	181	76.12	182.15	455.3	0.0028	142000	-1.08
dichlorvos	40	62-73-7	350	220.98	25.15	298.3	0.0158	8000	1.47
chloroform	41	67-66-3	95	119.38	-63.4	209.75	197	7950	1.97

Table 8. Input data of physico-chemical properties for calibration and sensitivity analysis in MUSEM (*continued*)

Compound Name	No	CAS No	PRTR No	Molecular weight (g/mol)	Fusion point (°C)	Boiling point (°C)	Vapor pressure (mmHg)	Solubility (mg/L)	Octanol-water partition coefficient (logPow)
n,n-dimethylformamide	42	68-12-2	172	73.1	-60.15	213	3.87	1000000	-1.01
bromomethane	43	74-83-9	288	94.94	-93.45	179.7	1620	15200	1.19
chloromethane	44	74-87-3	96	50.49	-97.25	175.9	4300	5320	0.91
chloroethane	45	75-00-3	74	64.52	-138.55	134.6	1010	6710	1.43
chloroethylene	46	75-01-4	77	62.5	-153.69	119.46	2980	8800	1.62
dichloromethane	47	75-09-2	145	84.93	-94.78	178.37	435	13000	1.25
carbon disulfide	48	75-15-0	241	76.14	-111.35	161.8	359	1180	1.94
vinylidenechloride	49	75-35-4	117	96.94	-122.42	150.73	600	2420	2.13
trichloroacetaldehyde	50	75-87-6	208	147.39	-57.5	215.65	50	30000	0.99
2,2'-azobisisobutyronitrile	51	78-67-1	13	164.21	101.5	374.65	0.0067	350	1.1
isoprene	52	78-79-5	28	68.12	-145.9	127.25	550	642	2.42
1,2-dichloropropane	53	78-87-5	135	112.99	-100.05	173.1	53.3	2800	1.98
1,1,2-trichloroethane	54	79-00-5	210	133.41	-36.35	236.8	23	4590	1.89
2,5-dichloronitrobenzene	55	89-61-2	128	192	56	329.15	0.00571	14	3.09
o-dichlorobenzene	56	95-50-1	139	147	-16.5	256.65	1.36	156	3.43
o-chloroaniline	57	95-51-2	71	127.57	-14	259.15	0.204	8160	1.9
o-toluidine	58	95-53-4	225	107.16	-23.45	249.7	0.26	16600	1.32
2,4-toluenediamine	59	95-80-7	228	122.17	99.15	372.3	0.00017	74800	0.14
2-imidazolidinethione	60	96-45-7	32	102.16	203.5	476.65	2.02E-06	20000	-0.66
dinitrochlorobenzene	61	97-00-7	83	202.55	52.2	325.35	8.49E-05	8	2.17
nitrobenzene	62	98-95-3	240	123.11	5.8	278.95	0.245	2090	1.85

MUSEM의 입력을 위해, PRTR DB로부터 구한 배출량은 다음과 같이 점오염원(신고대상 배출·이동량 집계치)과 비점오염원(신고제외대상 배출량 추정치)의 총합으로 산정한다.

가. 점오염원

점오염원으로 인한 PRTR 집계치로부터, MUSEM을 위한 환경매체(대기, 물환경(육수역과 해수역), 토양)로 유입되는 화학물질의 배출량을 산정하고자 Fig. 15와 같이,

① 점오염원의 「물환경」 부분은 해당 수계별(육수역과 해수역)로 배출경로를 나누어, 배출·방류 끝부분이 하천이나 호수인 경우는 육수역으로, 해역인 경우는 해수역으로 각각 구분하여, MUSEM의 물환경으로 배출되는 화학물질량을 산정하였다.

: 하천이나 호수 → 육수역 물환경, 해역이나 하구 → 해수역 물환경

② 점오염원의 이동량중 「매립」 부분은 「매립으로 처분하는 경우 : 차단형」을 제외한, 나머지만 토양으로 배출되는 것으로 하여 MUSEM 입력값을 산정하였다.

나. 비점오염원

MUSEM에 적용할 비점오염원에 의한 환경매체(대기, 물환경, 토양)로 유입되는 화학물질량의 산정은 Fig. 15와 같이,

① 점오염원에 따른 MUSEM 입력값(화학물질 배출량)으로 각 환경매체(대기, 물환경, 토양)별 배출분율을 산정한 아래의 식을 이용, 비점오염원의 추정치로부터 MUSEM의 입력값을 산정한다.

$$Emission Rate_i = \frac{Emission_i}{Emission_{all}} \dots\dots\dots (35)$$

여기서;

$Emission Rate$: 화학물질의 환경매체별 배출분율(-)

i : 각 환경매체 ($Emission Rate_{air}$: 대기, $Emission Rate_{water_1}$: 육수역 물환경,

$Emission\ Rate_{water_2}$: 해수역 물환경, $Emission\ Rate_{soil}$: 토양,

$Emission\ Rate_{STP}$: 하수처리장)

$Emission$: 점오염원의 각 환경매체별 화학물질 배출량(kg/day)

$Emission_{all}$: 점오염원의 화학물질 총배출량(kg/day)

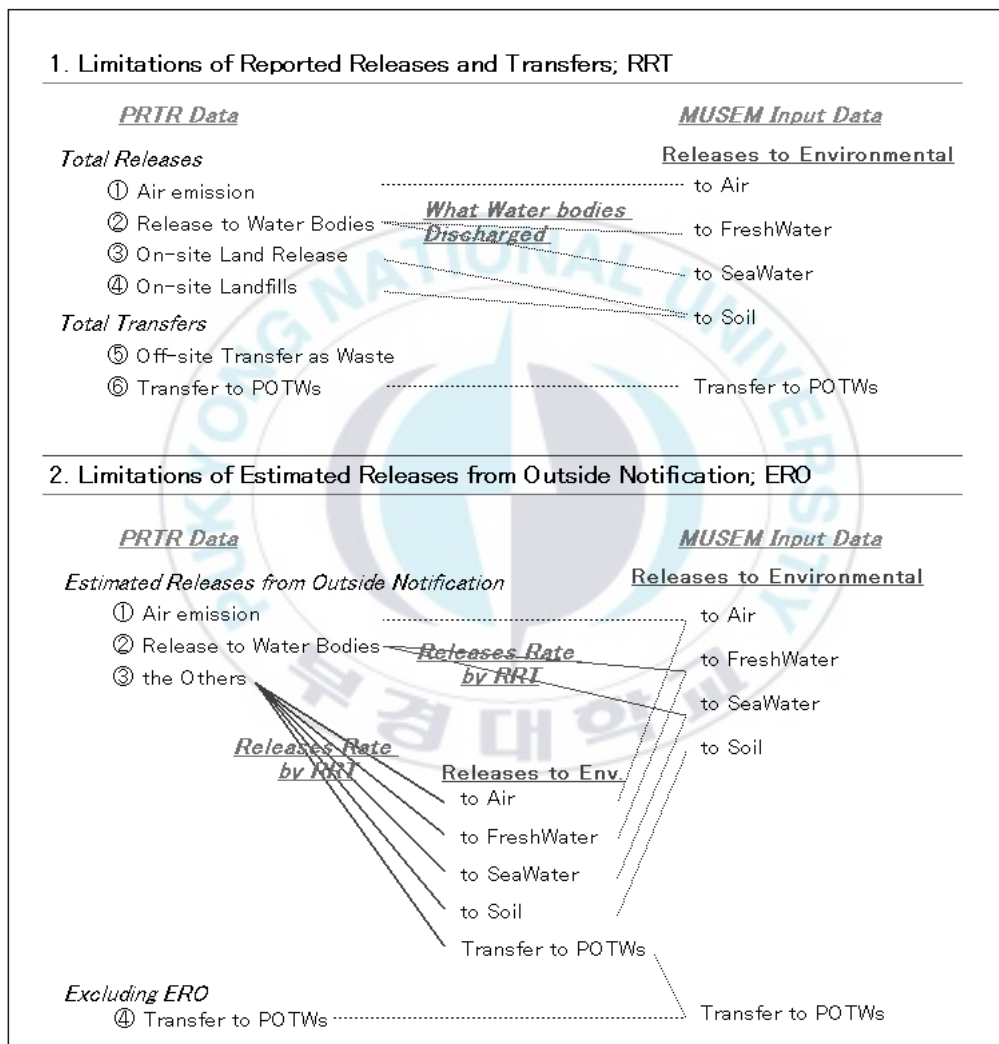


Fig. 15. Determination of chemical emission flow to each compartments (air, freshwater, seawater, urban/industrial soil and STP) using PRTR result for MUSEM.

② 비점오염원의 「물환경」 부분은 아래의 식에서 구한 배출분을 $Emission Rate_{freshwater}$ 와 $Emission Rate_{seawater}$ 을 곱하여 MUSEM입력을 위한 육수역과 해수역 각각의 배출량을 구한다.

$$Emission Rate_{freshwater} = \frac{Emission Rate_{water_1}}{Emission Rate_{water_1} + Emission Rate_{water_2}} \dots\dots\dots (36)$$

$$Emission Rate_{seawater} = \frac{Emission Rate_{water_2}}{Emission Rate_{water_1} + Emission Rate_{water_2}} \dots\dots\dots (37)$$

여기서;

$Emission_{freshwater}$: 점오염원의 물환경중 육수역 배출분을(-)

$Emission_{seawater}$: 점오염원의 물환경중 해수역 배출분을(-)

③ 비점오염원의 「이동체」 부분은 대기로만 배출되는 것으로 한다.

④ 비점오염원의 「그외」 부분은 $Emission Rate_{air}$, $Emission Rate_{water_1}$, $Emission Rate_{water_2}$, $Emission Rate_{soil}$, $Emission Rate_{STP}$ 을 MUSEM입력을 위한 각각의 환경매체(대기, 육수역, 해수역, 토양, 하수처리장 등)별 배출량을 구한다.

이상과 같은 방법으로 MUSEM입력을 위해, PRTR의 점오염원과 비점오염원의 DB로부터 일본 전 행정구역 47개소(Regional area)와 Continental area 각각에 대하여 환경매체(대기, 육수역 물환경, 해수역 물환경, 토양)별 화학물질배출량을 산정하였다.

이때 동경지역을 Regional area로 선정한 경우의 화학물질 배출량은 Table 9와 같다. 62종의 화학물질중 동경지역에서는 dichloromethane의 환경중 배출량이 20,397kg/day(대기 99.91%)로 가장 많았으며, 다음으로 n,n-dimethylformamide 5,575kg/day(대기 83.39%, 물환경 3.81% 등), 1,2-dichloropropane 972kg/day(대기 99.81%), 1,3-dichloropropene 717kg/day(대기 74.02%, 물환경 25.98% 등), 1,3-butadiene 696kg/day(대기 100%) 등의 순으로, 상위 5종의 화학물질 대부분은 대기중으로 배출되는 것으로 나타났다. 또한 4-ethenylcyclohexene을 포함한 12종의 화학물질은 동경에서는 배출되지 않는 것으로 나타났다.

일본전역의 경우, 화학물질 배출량은 dichloromethane 229,509kg/day(대기 99.92%), n,n-dimethylformamide 7,4094kg/day(대기 83.53%), 1,3-dichloropropene 19,957kg/day(대기 74.05%, 물환경 25.95%)의 순으로 나타났다.

Table 9. Emission volumes of chemicals to target area using PRTR data (kg/day)

Compound Name	Regional area; Tokyo				Continental area; Japan except Tokyo			
	Air	Fresh water	Sea water	Soil	STP	Air	Fresh water	Sea water
p-chloronitrobenzene	0.0033	0	0.0057	0.077	0	0.343	0	0.587
p-nitroaniline	0	0	0	0	0.0178	0	0	0
4-ethenylcyclohexene	0	0	0	0	0	5.123	0	0.0822
methylaniline	5.26E-06	0	0	0	0	0.173	0	0
2-vinylpyridine	0	0	0	0	0	3.534	0	8.493
moca	2.518	0.376	0	0	0	17.230	2.572	0
p-chloroaniline	0	0.0222	0.00416	0	0	0	4.517	0.847
allylglycidylether	0.00195	0	0	0	0	10.976	0	0
1,3-butadiene	696.0	0	0	0	0	10903	0.0658	27.07
ethylidenedichloride	3.640	0.0121	0.151	0	0	2531	4.579	7.461
m-phenylenediamine	0	0	0	0	7.446	0	0	0
cyanuricchloride	0	0	0	0	0	0.0164	0	0.0767
piperazine	0.000126	5.43E-05	0.0284	0	0	0.121	0.0525	27.26
diethylenetriamine	0.00369	0	0.469	4.73E-05	0.000284	2.936	0.00822	374.0
TCEP	0.710	0	0	0	0	31.20	0	0
decabromodiphenyl ether	0	0	0	0	0	7.403	2.362	0.0466
2,6-dichlorobenzonitrile	0.861	0	0	0	0	279.2	0	0
3,3'-dimethylbenzidine	0	0	0	0	0	0	0.00548	0
fenitrothion	45.15	36.12	0	0	81.268	975.7	780.5	0
simazine	0.0117	3.199	0.434	0	0	0.496	136.2	18.46
								0

Table 9. Emission volumes of chemicals to target area using PRTR data (kg/day) (*continued*)

Compound Name	Regional area; Tokyo				Continental area; Japan expect Tokyo					
	Air	Fresh water	Sea water	Soil	STP	Air	Fresh water	Sea water	Soil	STP
1,4-dioxane	18.77	0.412	1.517	0	1.060	583.2	18.22	67.23	0	46.94
tri-n-butyl phosphate	0	1.294	0.108	0	0	0	17.40	1.457	0	0
tetramethylthiuram disulfide	1.118	41.45	5.004	0	0	16.95	628.6	75.88	0	0
ziram	2.54	0	0	0	0	694.8	0	0	0	0
p-phenetidine	3.03E-06	0	0	0	4.54E-05	0.0329	0	0	0	0.493
cis-1,2-dichloroethylene	0	0.00822	0	0	0	6.195	17.40	1.819	0	0
trans-1,2-dichloroethylene	0.000586	2.93E-07	0	0	0	54.47	0.0274	0	0	0
tetrachloroisophthalonitrile	84.80	1.665	1.665	0	0	1379	27.09	27.09	0	0
EPN	9.91E-05	0.866	0.152	9.91E-05	0.000793	0.0386	366.9	66.30	0.0414	0.342
dinitrotoluene	0	0	0	0	0	27.29	0	10	0	84.93
hydrazine	1.356	3.354	1.177	0	0.442	167.1	403.1	145.0	0	54.50
linuron	9.628	9.055	0	14.900	1.146	183.5	172.6	0	284.0	21.84
diazinon	6.183	1.237	0	0	6.183	654.4	130.9	0	0	654.4
BPMC	0.0630	0.0630	0	0	0	373.4	373.4	0	0	0
1,3-dichloropropene	530.4	162.0	24.20	0	0	14248	4348	644.4	0	0
ethylenediaminetetraacetic acid	0	3.918	0.0306	0	37.413	0	449.2	3.508	0	1116
dimethoate	0	0	0	0	0.318	0	0	0	0	200.3
amitrole	0.000131	0	0.000339	0	0	0.0324	0	0.0842	0	0
thiourea	0	0.225	0	0	0.00320	0.00274	316.7	0	0	4.509
dichlorvos	49.77	1.846	0	0	5.969	971.8	36.10	0	0	109.4
chloroform	156.5	2.561	10.218	0	2.298	6618	129.7	518.6	0	107.2

Table 9. Emission volumes of chemicals to target area using PRTR data (kg/day) (*continued*)

Compound Name	Regional area; Tokyo					Continental area; Japan expect Tokyo				
	Air	Fresh water	Sea water	Soil	STP	Air	Fresh water	Sea water	Soil	STP
n,n-dimethylformamide	4649	140.3	72.094	1.109	712.2	57242	1734	891.5	13.95	8638
bromomethane	208.3	0	0	0	0	9970	0	0.0658	0	0
chloromethane	16.62	0.00333	0.00666	0	0.00832	12232	2.242	5.252	0	5.537
chloroethane	0	0	0	0	0	3778	0	0.384	0	0
chloroethylene	1.28E-06	1.72E-09	2.31E-08	9.29E-10	1.9E-08	2206	2.882	39.73	1.507	32.60
dichloromethane	20379	12.71	4.774	0	0.0466	208950	121.9	37.77	0.107	2.688
carbon disulfide	0.495	0.00993	0.000152	0	0.00117	19012	380.4	5.207	0	43.85
vinylidenechloride	0.219	0.00519	0.000221	0	0	913.9	10.26	0.947	0	0
trichloroacetaldehyde	0	0	2.55E-05	0	0	0	0	493.2	0	0
2,2'-azobisisobutyronitrile	0	0	0	0	0	0.0740	0.00274	1.096	0	0
isoprene	0.000341	0	0	0	4.67E-05	334.6	0	0	0	45.87
1,2-dichloropropane	970.6	0	0.389	0	1.459	4743	0	1.905	0	7.135
1,1,2-trichloroethane	66.51	10.588	22.01	0	0	546.7	86.80	180.9	0	0
2,5-dichloronitrobenzene	0	0	0	0	0	0.548	0	0.00548	0.0740	0
o-dichlorobenzene	0.212	0.0028	0.00357	2.33E-05	0.0145	410.2	5.417	6.896	0.0523	28.00
o-chloroaniline	0.00168	0.09542	0.00168	0	0.152	0.0739	4.179	0.0739	0	6.654
o-toluidine	0.00292	2.25E-05	0	0	0.0144	10.671	0.0796	0	0	52.58
2,4-toluenediamine	0	0	0	0	0	0.712	0	0	0	7.397
2-imidazolidinethione	0	0	0	0	0	0.0110	0	0	0	0
dinitrochlorobenzene	0	0	0	0	0	3.775	0	0.507	0.466	0
nitrobenzene	6.05E-06	6.07E-08	3.46E-06	0	9.16E-05	25.406	0.274	14.53	0	384.9

1.2 환경매체중 화학물질 분포 및 실측치와 비교평가

62종의 화학물질에 대한 MUSEM의 예측결과, 일본전지역을 대상으로 한 환경매체(대기, 육수역 물환경, 도시·산업용지)중 농도는 Fig. 16에, Regional area를 동경으로 하였을 때의 환경매체별 잔류분포(%)는 Fig. 17과 같다.

동경지역에 있어서 각 매체별 잔류량 분포를 살펴보면, 한 매체에 50%이상 다량분포하는 물질은 대기의 경우 1,3-butadiene (99.8%) 등 16종, 물환경의 경우 piperazine (99.8%) 등 41종에 달했다. 토양의 경우는 p-chloronitrobenzene(88.5%) 등의 3종이 50%이상 다량 분포하였고, 저질의 경우는 tri-n-butyl phosphate이 21.9%로 가장 높은 분포비를 나타내는 것으로 예측되었다.

이러한 62종의 제2종감시화학물질에 대한 매체별잔류비(%)는 수역에 대부분의 물질이 분포하는 것으로 예측되었다.

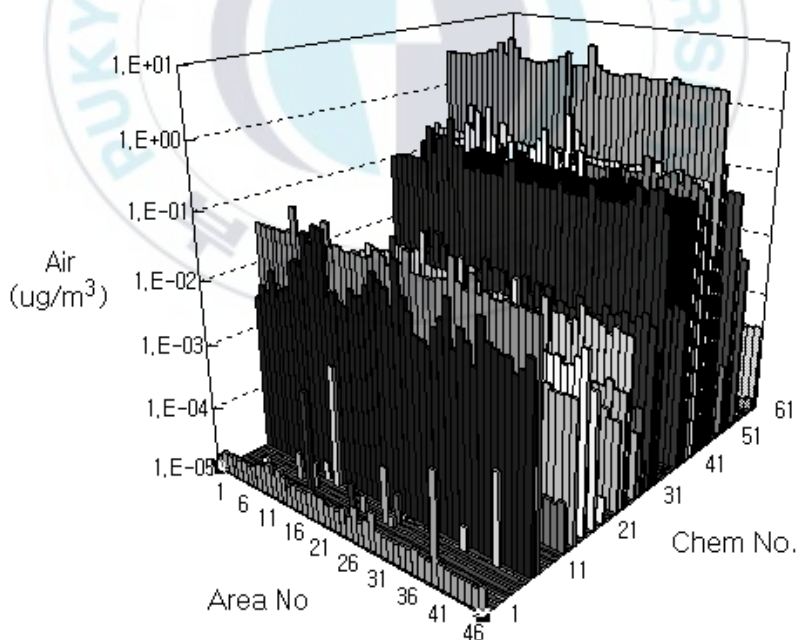


Fig. 16. Simulation result of chemicals concentration in 47 Prefectures of Japan.

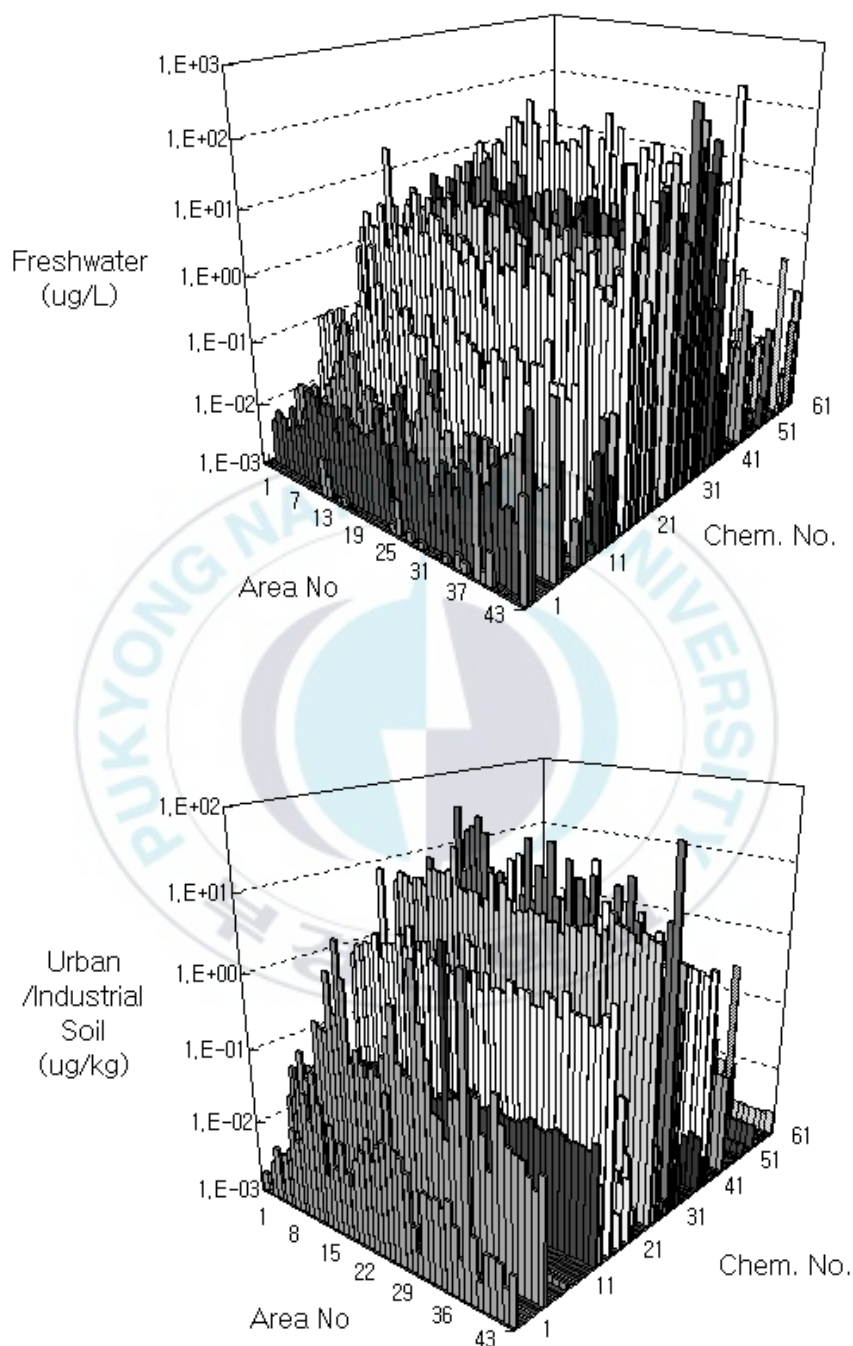


Fig. 16. Simulation result of chemicals concentration in 47 Prefectures of Japan (*continued*).

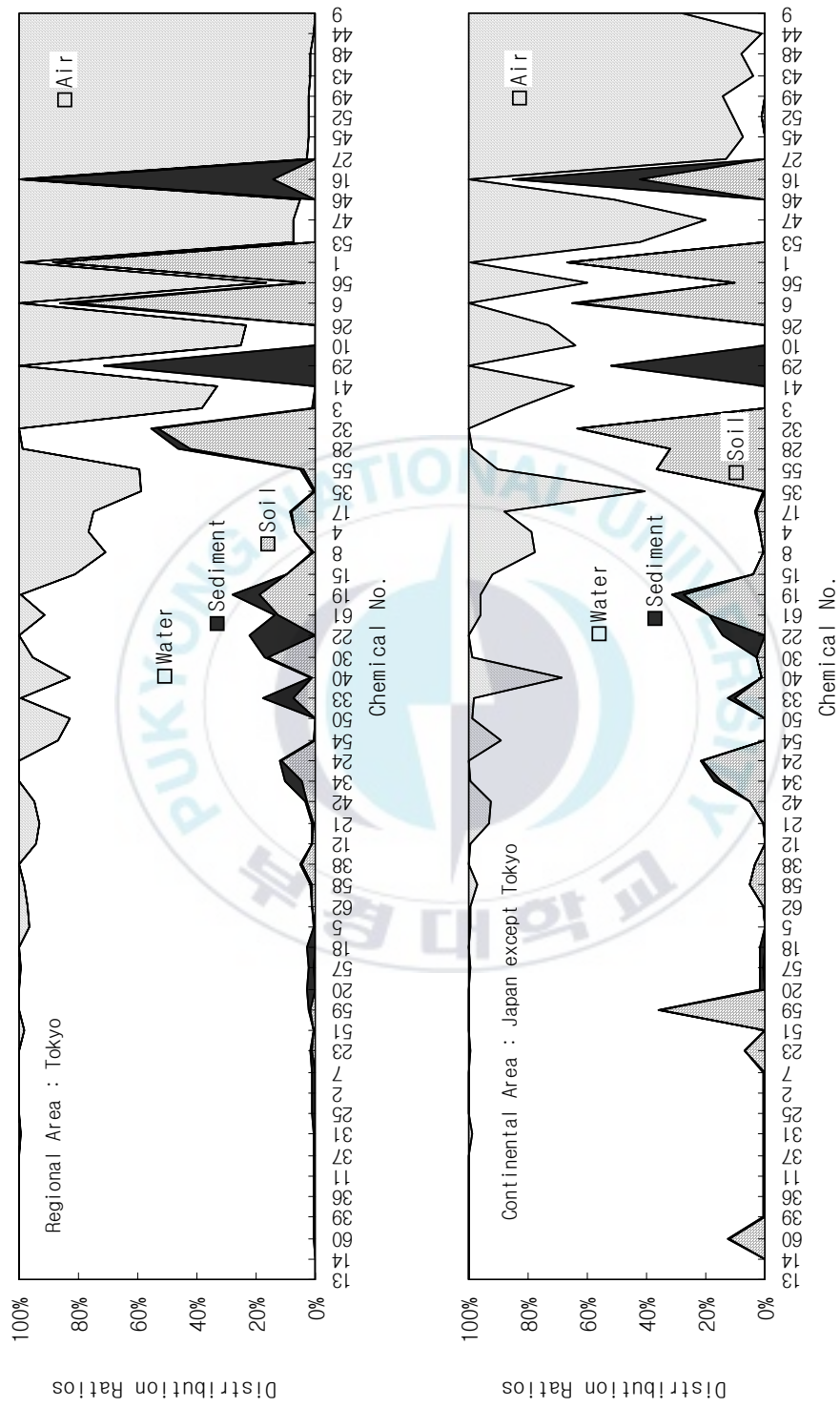


Fig. 17. Chemicals distribution ratios in each compartment (%).

日本環境省의 黒本調査데이터 등의 실측치를 참조할 수 있도록 구축한 실측치DB를 이용하여 19종의 화학물질에 대하여 모델의 예측결과와 비교 평가를 실시하였다. 일본의 47개의 행정구역에 대한 각 항목별 MUSEM을 이용한 모델결과치와 실측치 비교는 Fig. 18에 나타내었다.

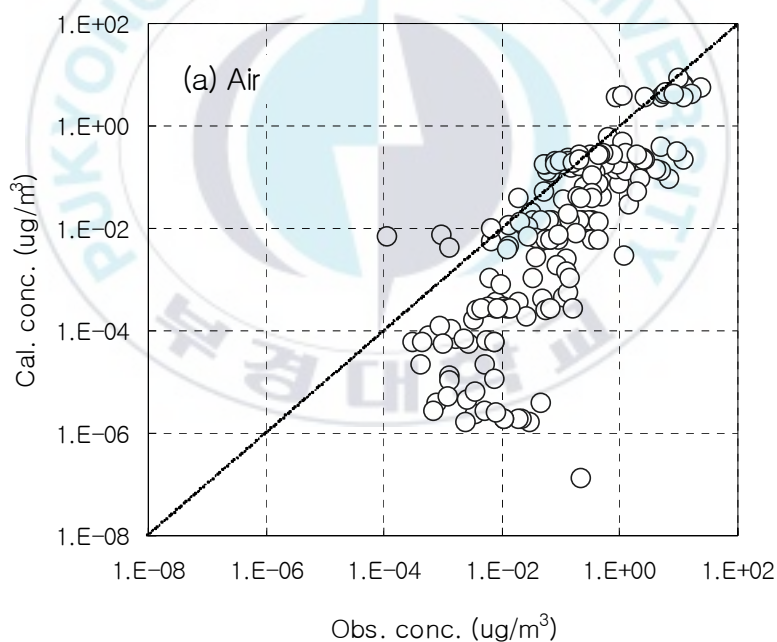


Fig. 18. Comparison of the observed and simulated chemicals concentration.

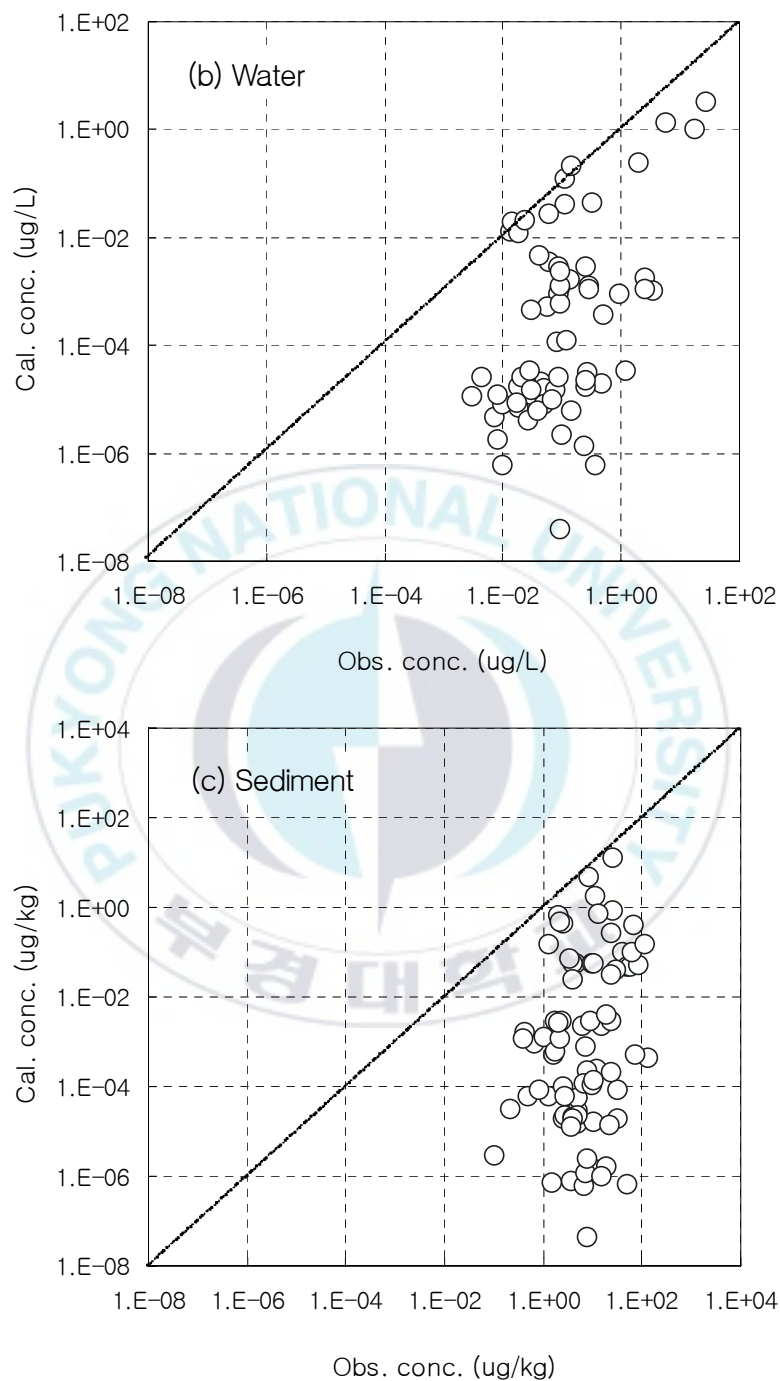


Fig. 18. Comparison of the observed and simulated chemicals concentration (*continued*).

1.3 민감도 분석

모델에 적용된 계수중 그 중요도가 클 것으로 판단되는 옥탄올-물 분배계수와 분해계수에 대하여 민감도 분석을 실시하였다. Regional area 및 Continental area에 대하여 대기, 육수역 물환경, 도시·산업용지의 토양, 육수역의 저질에서의 화학물질농도 변화를 살펴보았다(Fig. 19~Fig. 22).

옥탄올-물 분배계수에 따른 환경매체중의 화학물질 농도변화는 도시·산업용지의 토양 및 담수의 저질에서 상대적으로 크게 나타났으며, 대기와 담수에서는 상대적으로 작게 나타났다. 이는 옥탄올-물 분배계수에 영향을 미치는 유기물 존재량의 차이에 기인한 것으로 판단된다. Regional area 및 Continental area에 따른 분포형태는 대기의 경우를 제외하고는 거의 유사한 형태를 나타내었다.

분해계수에 의한 환경매체중의 화학물질 농도변화는 Regional area의 경우 육수역 물환경 및 도시·산업용지의 토양, 육수역의 저질에서의 변화폭이 비슷하게 나타났으며 대기의 경우는 상대적으로 작게 나타났다. Continental area의 경우는 Regional area 보다는 변동폭이 다소 작게 나타났다.

전체적으로는 옥탄올-물 분배계수보다 분해계수에 의한 환경매체중 화학물질의 농도 변화폭이 큰 것으로 나타났다.

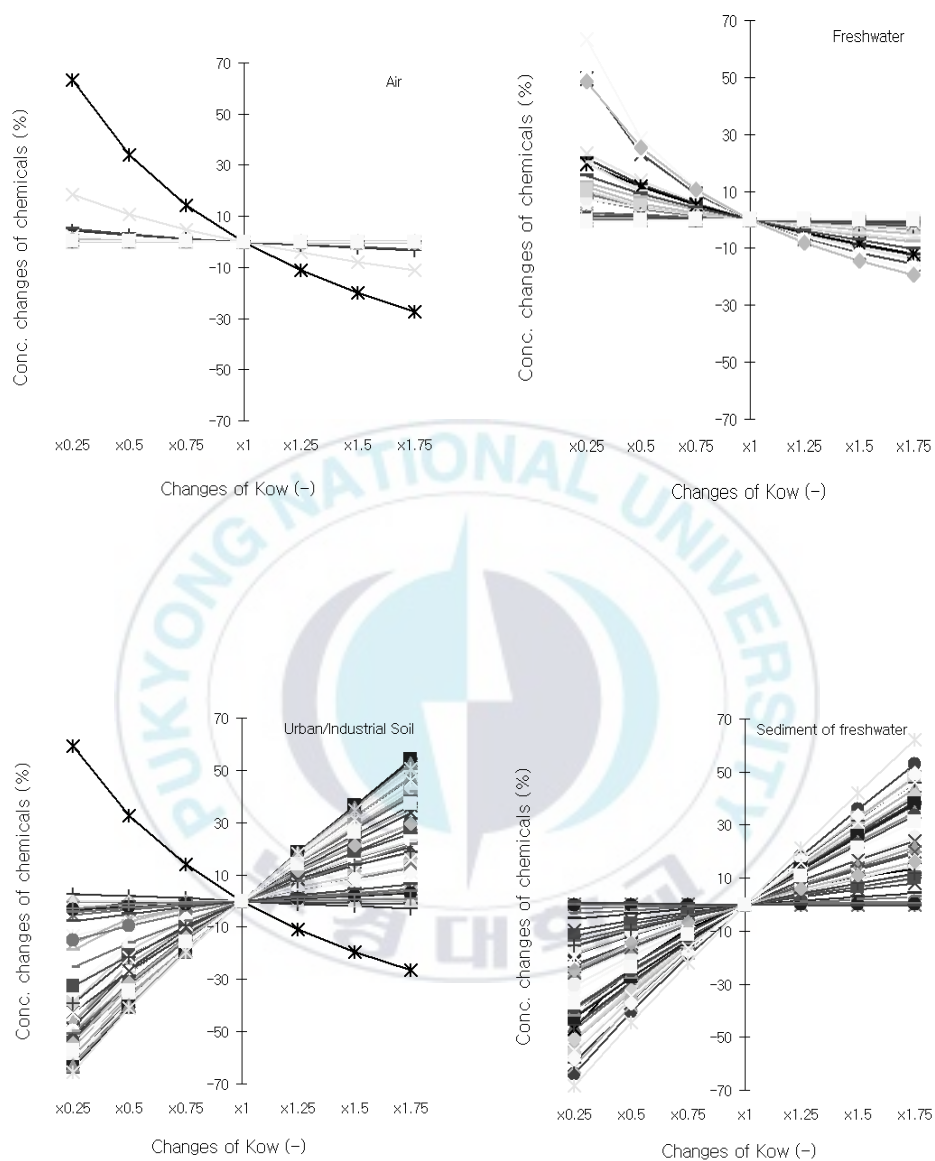


Fig. 19. Sensitivity analysis of chemical concentrations by change of values of K_{ow} (Regional area; Tokyo).

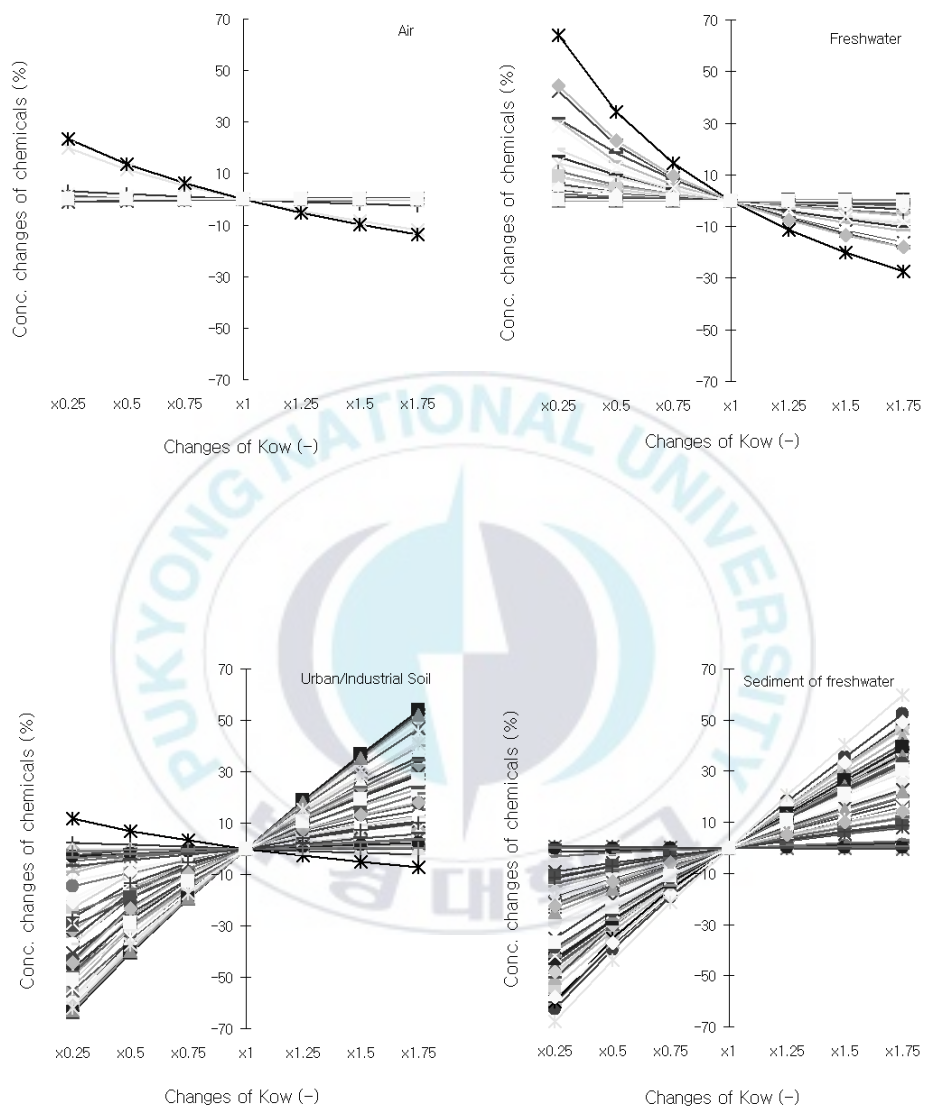


Fig. 20. Sensitivity analysis of chemical concentrations by change of values of K_{ow} (Continental area; Japan except Tokyo).

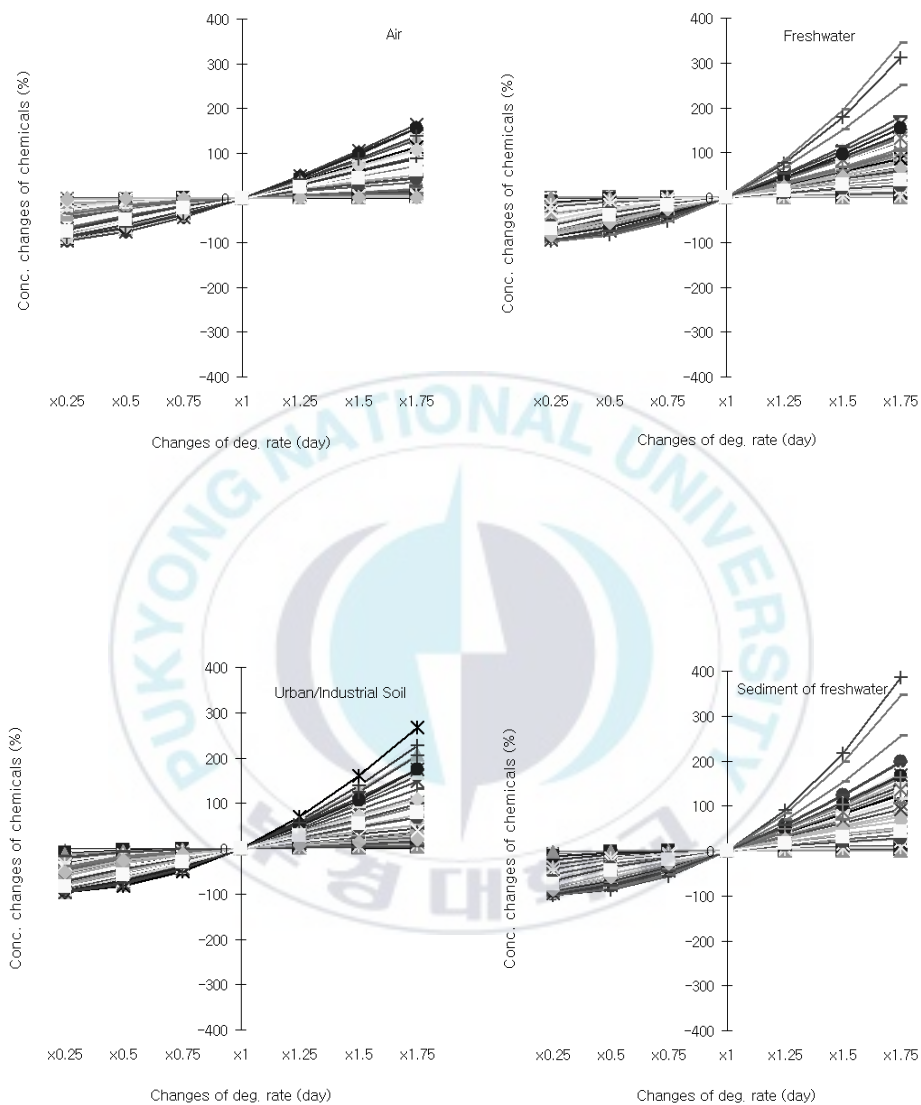


Fig. 21. Sensitivity analysis of chemical concentrations by change of values of degradation rate (Regional area; Tokyo).

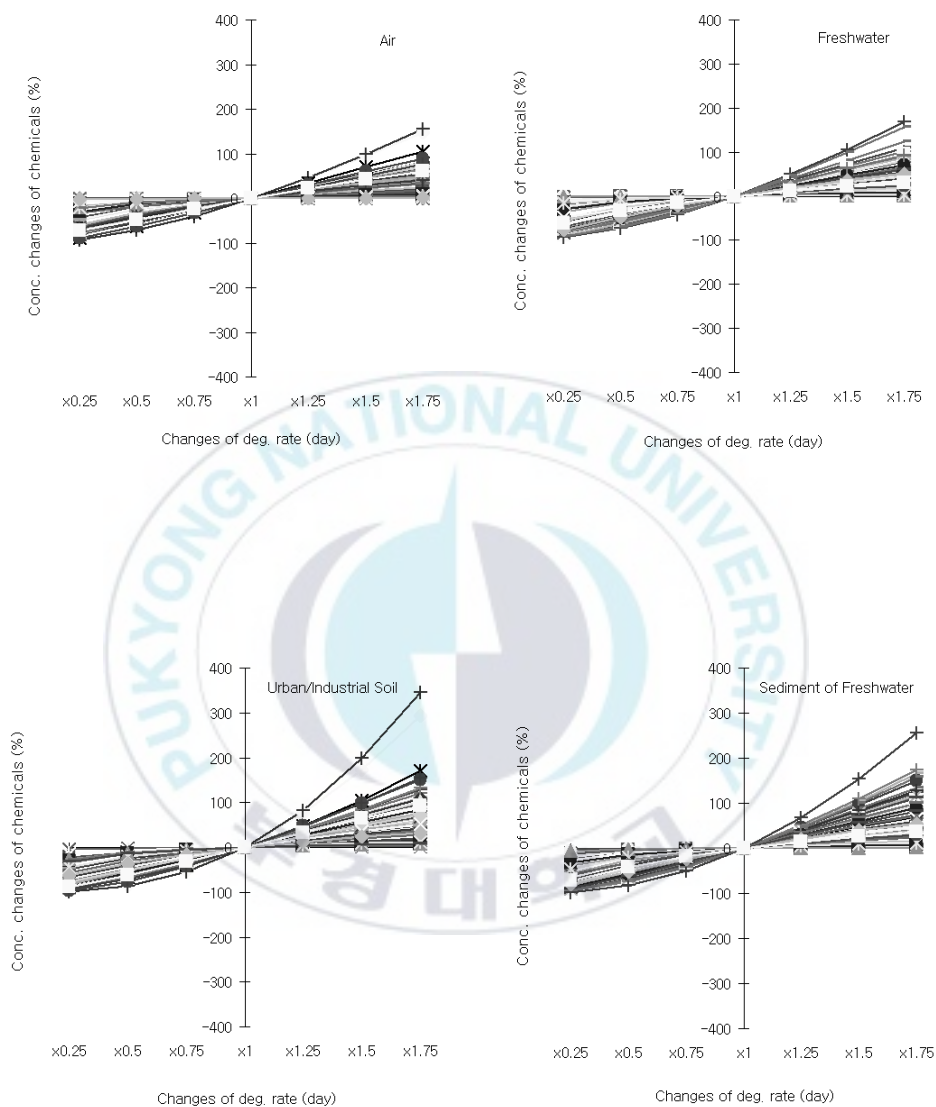


Fig. 22. Sensitivity analysis of chemical concentrations by change of values of degradation rate (Continental area; Japan except Tokyo).

2. 인간의 1일섭취량

인간을 보호하는 것은 화학물질의 위해성평가에 중요한 목적이며, 인간은 호흡, 토양유입 및 피부접촉을 통하여 환경매체중 존재하는 화학물질에 직접 노출되며, 음식물과 음용수 등을 통해 간접 노출된다. 인간 및 생물체의 노출가능성은 일련의 환경거동 과정을 거쳐 환경매체중 잔류하는 유해물질이 인체 및 생체에 노출되는 양을 반영한다.

MUSEM의 적용성을 살펴보고자 화학물질의 노출가능성 평가를 위하여, 일본지역을 대상으로 21종의 화학물질에 대한 인간의 1일 화학물질 섭취량을 산정하였다. 이때 모델링을 위한 대상연구지역 및 입력자료는 Table 10과 같다.

Table 10. Input data of environmental characteristics for estimation of daily chemical intake using MUSEM

Regional area	Region with highest emission load by each chemical
Continental area	Japan except Regional area
Substances	21 Chemicals (Type II Monitoring chemical substances in Japan)
Emission load	Emission database by PRTR result

2.1 모델입력자료 산정

2.1.1 대상지역 선정

가. Regional area

위해도 가능성이 높은 지역에 대해서 인간의 건강 및 생태계에 미치는 화학물질의 유해한 영향의 평가를 실시하기위해, 일본 행정구역(47개 都道府縣)중 각 물질별 발생량이 가장 많은 지역을 Regional area로 선정하였다. MUSEM에 필요한 일본 각 지역의 일반현황은 Table 7과 같으며, 대상지역면적 및 토지비율은 대기, 물환경, 토양, 저질 등의 매체들의 체적을 구하는데 이용되며, 인구와 하수도 보급율은 하수처리장의 규모산정에 이용하였다.

나. Continental area

일본 전 지역에서의 화학물질 거동을 고려하기 위하여, 대상지역을 Regional area와 Continental area로 나누어 화학물질의 영향을 상호 비교·고찰하였다. Continental area는 일본전역에서 Regional area를 제외한 부분으로 설정하였으며, Continental area의 하수처리장의 규모를 산정하기 위하여 인구수는 일본 총인구에서 Regional area의 인구수를 제외한 값으로, 하수도보급율은 일본전국의 하수도보급율을 이용하였다.

2.1.2 대상물질 선정

제2종감시화학물질(개정이전의 지정화학물질)로 지정되어 있으나, 이들 중 제조 수입 또는 배출량이 적어서 인간의 건강에 피해를 일으킬 위험이 적은 물질들이 존재한다. 그러므로 모든 제2종감시화학물질에 대해 반드시 위해성 지정의 판단을 위해 위해성평가를 실시해야할 필요성은 없으므로, 위해도가 높을 가능성이 있는 물질을 뽑아 평가를 실시하는 것이 좋다고 여겨진다. 본 장에서는 제2종감시화학물질중 chloromethane을 포함하여 임의적으로 21종을 선택, 모델에 의한 인간의 1일 섭취량을 추정하였다. Table 11은 선정된 물질의 분자량, 용해도, 증기압, 옥탄올-물 분배계수 등의 일반 물성치를 나타내었다.

2.1.3 화학물질 배출량 산정

모델 입력을 위해 선정된 21종 화학물질의 환경중 배출량은 일본의 PRTR자료를 활용하였으며, 점오염원(신고대상배출량 및 이동량의 대상화학물질별 집계치)에 대해서는 Table 12에, 비점오염원(신고제외 대상 배출량의 화학물질의 추정치)은 Table 13에 나타내었다. MUSEM을 위한 각 환경매체별 배출량 산정법은 민감도 분석을 위하여 적용하였던 Fig. 15와 같다.

2.1.4 분해속도상수

환경중으로 배출된 화학물질의 잔류여부는 대기, 물환경, 토양 등에서 일어나는 분해과정에 의해 결정되므로, 분해속도상수 변화에 따른 인간의 1일 섭취량을 산정하고자 한다.

Table 11. Input data of physico-chemical properties and regional characteristics for estimation of daily chemical intake using MUSEM

Compound Name	CAS No	PRTR No	Type II monitoring chemical substances	Regional area	Molecular weight (g/mol)	Fusion point (°C)	Boiling point (°C)	Vapor pressure (20°C, KPa)	Solubility (20°C, g/L)	Octanol-water	
										partition coefficient (logPow)	assumption calculated
carbon disulfide	75-15-0	241	366	Gifu-ken	76.14	111.6	46.5	34.7	2.3	2.11	1.84~2.16
chloromethane	74-87-3	96	370	Inaraki-ken	50.49	97.72	23.76	489	7.3	0.85	0.94
ethylidenedichloride	107-06-2	116	5	Inaraki-ken	98.96	35.4	83.5	8.13	8.69	1.48	1.46
1,3-butadiene	106-99-0	268	368	Kanagawa-ken	54.09	109	4.5	240	0.735	1.99	1.9
bromomethane	74-83-9	288	372	Kochi-ken	94.94	94	4	152	17.5	1.19	1.08
vinylidenechloride	75-35-4	117	378	Tokushima-ken	96.94	122.5	31.7	66.66	0.21 (at 25°C)	2.17	2.37
1,2-dichloropropane	78-87-5	135	11	Tokyo-to	112.99	100.42	96.2	5.6	2.6		1.99
nitrobenzene	98-95-3	240	409	Inaraki-ken	123.11	6	211	0.02	0.0019	1.85	1.88
isoprene	78-79-5	28	369	Kanagawa-ken	68.12	145.95	34.067	65.7	0.3	2.3	
thiourea	62-56-6	181	389	Fukushima-ken	76.12	176~178	-	0.00001	9	2.5	1.02
ethylenediaminetetraacetic acid	60-00-4	47	388	Hyogo-ken	292.25	240	-	0.00133	0.51		1.97
1,1,2-trichloroethane	79-00-5	210	375	Osaka-fu	133.4	35	113~114	2.53	4.5	2.07	2.05
trans-1,2-dichloroethylene	156-60-5	119	380	Yamaguchi-ken	96.94	49.4	48	26.7 (at 25°C)	0.006 (at 25°C)	2.09	1.98
cis-1,2-dichloroethylene	156-59-2	118	379	Osaka-fu	96.94	81.5	60	26.7 (at 25°C)	8		1.98
o-chloroaniline	95-51-2	71	403	Osaka-fu	127.57	2	208.8	0.013	5.13	1.9	1.91
p-chloroaniline	106-47-8	72	404	Hyogo-ken	127.57	72.5	232	0.002	1	1.83	1.72
dinitrochlorobenzene	97-00-7	83	413	Fukuoka-ken	205.55	54	315	0.00001	0.35	2.17	2.27
tribromomethane	75-25-2	222	373	Okayama-ken	252.73	8.3	149	0.7	1	2.67	2.37
2,5-dichloronitrobenzene	89-61-2	128	415	Fukuoka-ken	192	52.8	267	0.01	0.083	2.9	3.3
p-nitroaniline	100-01-6	234	407	Aichi-ken	138.12	146	335	0.2	0.8	1.39	1.26
amitrole	61-82-5	19	434	Toyama-ken	84.08	159	-	0.000001	280	1.48	

Table 12. The chemical releases and transfers using reported facilities data of PRTR in Japan for estimation of daily chemical intake (kg/day)

Compound name	Releases				Transfers		Total
	air emission	water bodies	land	landfills	waste	POTWs	
carbon disulfide	19008	385.6	0	0	58.18	43.84	19495
chloromethane	12117	7.42	0	0	104.2	5.48	12234
ethylidenedichloride	2506	12.13	0	0	4202	0.05	6720
1,3-butadiene	1691	27.13	0	0	502.2	0.36	2220
bromomethane	1486	0.07	0	0	73.21	0	1559
vinylidenechloride	912.4	11.25	0	0	274.0	0.003	1198
1,2-dichloropropane	596.7	0.24	0	0	1029	0.90	1627
nitrobenzene	25.41	14.8	0	0	350.7	384.9	775.8
isoprene	334.6	0	0	0	150.6	45.9	531.1
thiourea	0.003	314.7	0	0	720.7	4.48	1040
ethylenediaminetetraacetic acid	0	70.65	0	0	354.7	178.4	603.7
1,1,2-trichloroethane	45.04	22.12	0	0	215.0	0	282.2
trans-1,2-dichloroethylene	54.47	0.027	0	0	126.8	0	181.3
cis-1,2-dichloroethylene	6.19	19.31	0	0	228.3	0.005	253.8
o-chloroaniline	0.06	3.62	0	0	140.5	5.67	149.9
p-chloroaniline	0	5.21	0	0	0	0	5.21
dinitrochlorobenzene	3.78	0.51	0	0.47	0.55	0	5.30
tribromomethane	2.74	0	0	0	30.14	0	32.88
2,5-dichloronitrobenzene	0.55	0.005	0	0.07	20.79	0	21.42
p-nitroaniline	0	0	0	0	0.58	0.14	0.71
amitrole	0.03	0.07	0	0	21.94	0	22.04

일본 화학물질의 심사 및 제조 등의 규제에 관한 법률(化審法)에 의한 제1종 감시화학물질(클로로포름 등 616종)은 고농축성은 아니지만 난분해성이고, 인간에게 장기독성을 유발할 수 있는 우려가 있는 물질이므로, 일반적으로 환경중에서 비정상적으로 안정성을 가지며 분해되지 않는 물질로 취급되고 있다.

그러므로 21종의 대상물질의 특성을 고려하여, 각각의 환경매체중의 분해속도상수(k_{deg})가 0인 Case 1의 경우와 0이 아닌 Case 2의 경우의 2가지 가상시나리오를 적용 수치모델의 결과를 살펴보았다. 이때 분해속도상수가 0이 아닌 Case 2의 경우는 MUSEM에서 선택가능한 Table 3의 수치중 난분해성인 Table 14에 나타난 값으로 하였다.

Table 13. The estimated chemical releases using outside notification data of PRTR in Japan for estimation of daily chemical intake (kg/day)

Compound Name	Listed Industries	Non- listed Industries	Households	Mobile source	Total
carbon disulfide	4.69	0	0	0	4.69
chloromethane	132.0	0	0	0	132.0
ethylidenedichloride	28.65	0	0	0	28.65
1,3-butadiene	0	0	0	10306	10306
bromomethane	0	8692	0	0	8692
vinylidenechloride	1.73	0	0	0	1.73
1,2-dichloropropane	5127	0	0	0	5127
nitrobenzene	0.01	0	0	0	0.011
isoprene	0.003	0	0	0	0.003
thiourea	2.32	0	0	0	2.32
ethylenediaminetetraacetic acid	1361	0	0	0	1361
1,1,2-trichloroethane	846.5	0	0	0	846.5
trans-1,2-dichloroethylene	0.005	0	0	0	0.005
cis-1,2-dichloroethylene	0	0	0	0	0
o-chloroaniline	1.87	0	0	0	1.87
p-chloroaniline	0.19	0	0	0	0.19
dinitrochlorobenzene	0	0	0	0	0
tribromomethane	1.65	7.59	24.98	0	34.22
2,5-dichloronitrobenzene	0	0	0	0	0
p-nitroaniline	1.87	0	0	0	1.87
amitrole	0.02	0	0	0	0.019

Table 14. Biodegradation rates of each scenario for estimation of daily chemical intake (1/day)

Case 1 : Biodegradation rate, $k_{deg} = 0$		
Case 2 : Biodegradation rate, $k_{deg} > 0$		
Air	(kdeg air)	0
Water	(kdeg water)	0.00462
Soil	(kdeg soil)	0.00231
Sediment	(kdeg sed)	0.000231
STP	(kdeg STP)	2.4

2.2 인간의 1일 섭취량 산정

인간은 생활환경중에서 환경매체에 분포하는 화학물질에 직·간접적으로 노출되고, 다양한 경로를 통해 화학물질을 섭취한다. 인간의 섭취량 산정시 필요한 일본인의 평균체중은 50kg, 공기의 1일 호흡량은 $20\text{m}^3/\text{day}$, 음료수의 일일섭취량은 $2\text{L}/\text{day}$ 로 가정하였다. 그리고 일본인의 1일 식품섭취량은 Table 15의 日本厚生省의 국민영양조사결과(2002)에 따랐다. 1일 어패류섭취량은 $0.094\text{kg}/\text{day}$, 잎채소는 $1.0434\text{kg}/\text{day}$, 뿌리야채는 $0.063\text{kg}/\text{day}$, 육제품은 $0.0763\text{kg}/\text{day}$, 유제품은 $0.1701\text{kg}/\text{day}$ 로 가정하였다.

Table 15. Average daily intake rates from food

Category		Daily intake rate (g/day)	
fishes and shellfishes		94.0	
leafy vegetables	grains	464.1	1,043.4
	green vegetables	279.4	
	dark green leafy vegetables	93.6	
	soybean	57.2	
	legumes and nuts	2.2	
	fruits	132.0	
	mushroom	14.9	
root vegetables		63.0	
meat		76.3	
milk		170.1	
others	seawood	13.5	688.3
	sweetener (sugar)	7.2	
	eggs	36.8	
	oil	11.3	
	confectionery	26.7	
	luxury foods	509.3	
	seasoning and spice	83.5	

2.2.1 인간의 화학물질 섭취량 비교

모델에 의해 추정된 일본지역에 있어서의 화학물질 1일 총섭취량은 Fig. 23과 Table 16과 같다. 이때의 노출경로별 섭취량의 분포비는 Fig. 24와 같으며, 인간의 화학물질 섭취경로인 어패류, 잎채소, 뿌리야채, 육제품 등은 음식물로 합하였으며, 공기의 호흡과 음용수의 섭취로 구분하였다.

MUSEM에 의한 모델링 결과, 분해가 일어나지 않는 것으로 가정한 Case 1의 경우, ethylenedichloride, bromomethane, 1,3-butadiene, chloromethane, vinylidenechloride, tribromomethane, carbon disulfide, trans-1,2-dichloroethylene, 1,2-dichloropropane, isoprene, nitrobenzen의 11종은 Regional area와 Continental area의 1일 섭취량이 거의 같은 값이었다. 이들 11종은 Fig. 24와 같이 대부분이 인간의 공기 호흡이 주요 섭취원인을 볼 때, Regional area와 Continental area간의 대기중 높은 이행성에 따른 것으로 여겨진다. 그 외의 높은 용해도(amitrole; 280 g/L) 등과 같은 다른 물성을 갖는 경우는 Regional area와 Continental area에서 인간의 1일 화학물질 섭취량이 수~수십배의 차이가 났다(Fig. 25, 26).

제2종감시화학물질이 난분해성임을 고려한 Case 2의 경우 1일섭취량은 분해를 고려하지 않은 Case 1의 1일 섭취량과 비교하여 Regional area에서는 0.01%~50%(평균 10%), Continental area에서는 0.01%~16%(평균 3%)로 더 많이 감소하였다(Fig. 25, 26). 화학물질의 분해속도의 크기는 1일 섭취량의 추정에 이처럼 큰 영향을 미치는 것을 알 수 있으며, 더욱 상세한 노출평가를 실시할 경우에는 생물 분해, 수중이나 대기중의 분해를 포함하여, 실제의 상황에 따라 그 값을 채택할 필요성이 있는 것으로 판단된다.

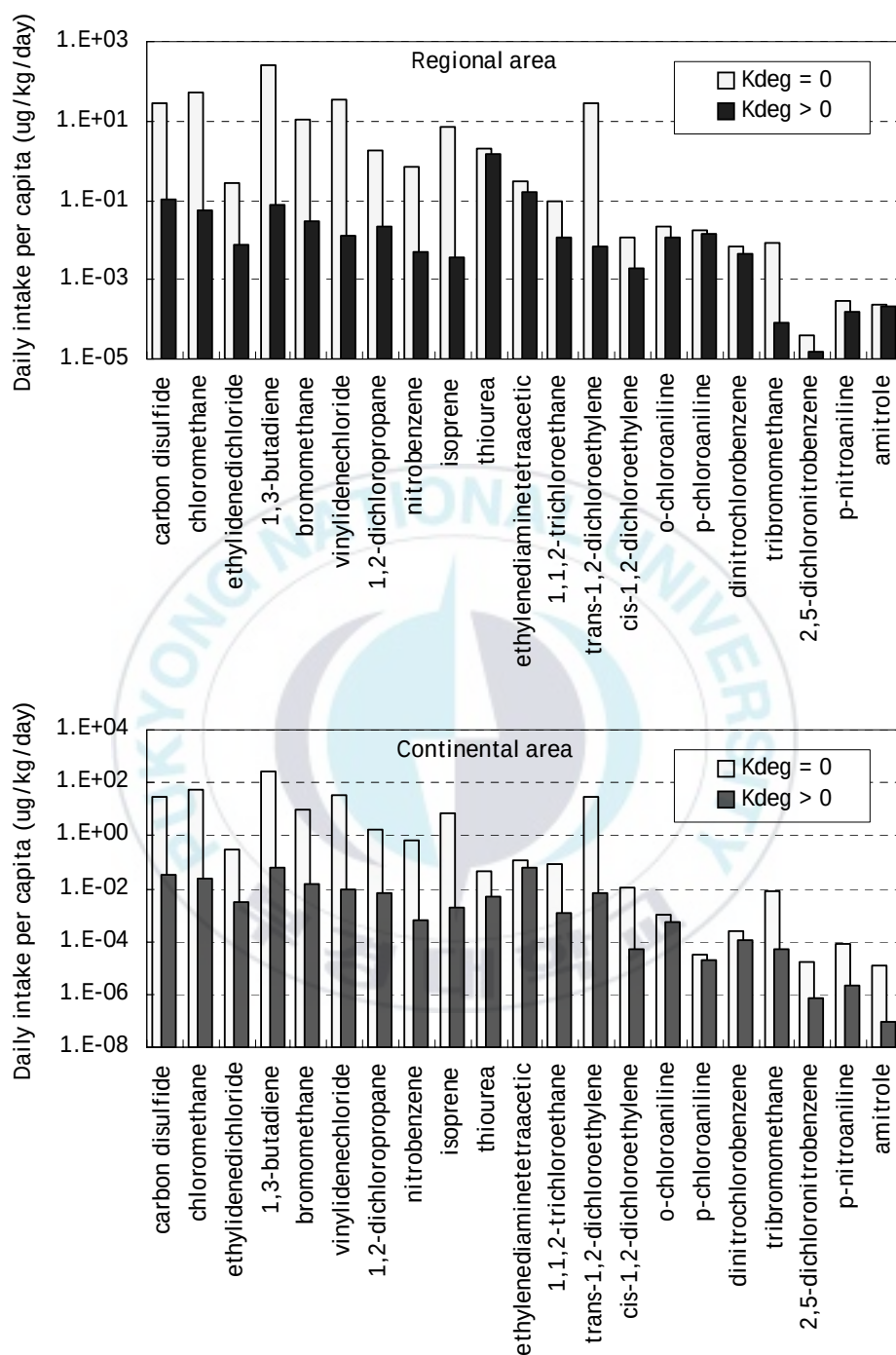


Fig. 23. Comparison of daily intake per capita from model predictions between in Regional area and Continental area.

Table 16. Daily intake per capita according to degradation rate in Continental area and Regional area (ug/kg/day)

Chemical name	$k_{deg} = 0$			$k_{deg} > 0$			Daily intake rate (-)	
	Regional area ①	Continental area ②	Regional area ③	Continental area ④	Regional area ⑤ = ③/①	Continental area ⑥ = ④/②		
carbon disulfide	2.79E+1	2.78E+1	1.10E-1	3.02E-2	3.94E-6	1.09E-6		
chloromethane	5.18E+1	5.17E+1	5.74E-2	2.47E-2	1.11E-6	4.78E-7		
ethylidenedichloride	2.85E-1	2.81E-1	7.65E-3	3.03E-3	2.68E-5	1.08E-5		
1,3-butadiene	2.56E+2	2.56E+2	7.40E-2	6.31E-2	2.89E-7	2.46E-7		
bromomethane	1.04E+1	1.04E+1	2.88E-2	1.47E-2	2.77E-6	1.41E-6		
vinylidenechloride	3.55E+1	3.55E+1	1.30E-2	8.96E-3	3.66E-7	2.52E-7		
1,2-dichloropropane	1.72E+0	1.71E+0	2.27E-2	7.22E-3	1.32E-5	4.22E-6		
nitrobenzene	6.79E-1	6.74E-1	4.88E-3	6.31E-4	7.19E-6	9.36E-7		
isoprene	7.07E+0	7.07E+0	3.46E-3	1.88E-3	4.89E-7	2.66E-7		
thiourea	2.08E+0	4.48E-2	1.51E+0	5.09E-3	7.26E-4	1.14E-4		
ethylenediaminetetraacetic acid	2.95E-1	1.12E-1	1.56E-1	6.28E-2	5.29E-4	5.61E-4		
1,1,2-trichloroethane	9.21E-2	8.13E-2	1.20E-2	1.28E-3	1.30E-4	1.57E-5		
trans-1,2-dichloroethylene	2.93E+1	2.93E+1	6.99E-3	6.51E-3	2.39E-7	2.22E-7		
cis-1,2-dichloroethylene	1.20E-2	1.02E-2	1.87E-3	4.76E-5	1.56E-4	4.67E-6		
o-chloroaniline	2.19E-2	9.44E-4	1.18E-2	5.72E-4	5.39E-4	6.06E-4		
p-chloroaniline	1.69E-2	3.33E-5	1.42E-2	1.89E-5	8.40E-4	5.68E-4		
dinitrochlorobenzene	7.17E-3	2.41E-4	4.31E-3	1.06E-4	6.01E-4	4.40E-4		
tribromomethane	8.05E-3	8.01E-3	8.39E-5	4.71E-5	1.04E-5	5.87E-6		
2,5-dichloronitrobenzene	3.88E-5	1.69E-5	1.58E-5	7.21E-7	4.07E-4	4.27E-5		
p-nitroaniline	3.04E-4	7.72E-5	1.52E-4	2.07E-6	5.00E-4	2.68E-5		
amitrole	2.31E-4	1.22E-5	2.09E-4	9.08E-8	9.05E-4	7.45E-6		
Max.	2.56E+2	2.56E+2	1.51E+0	6.31E-2	9.05E-4	6.06E-4		
Min.	3.88E-5	1.22E-5	1.58E-5	9.08E-8	2.39E-7	2.22E-7		
Avg.	2.02E+1	2.00E+1	9.71E-2	1.10E-2	2.57E-4	1.15E-4		

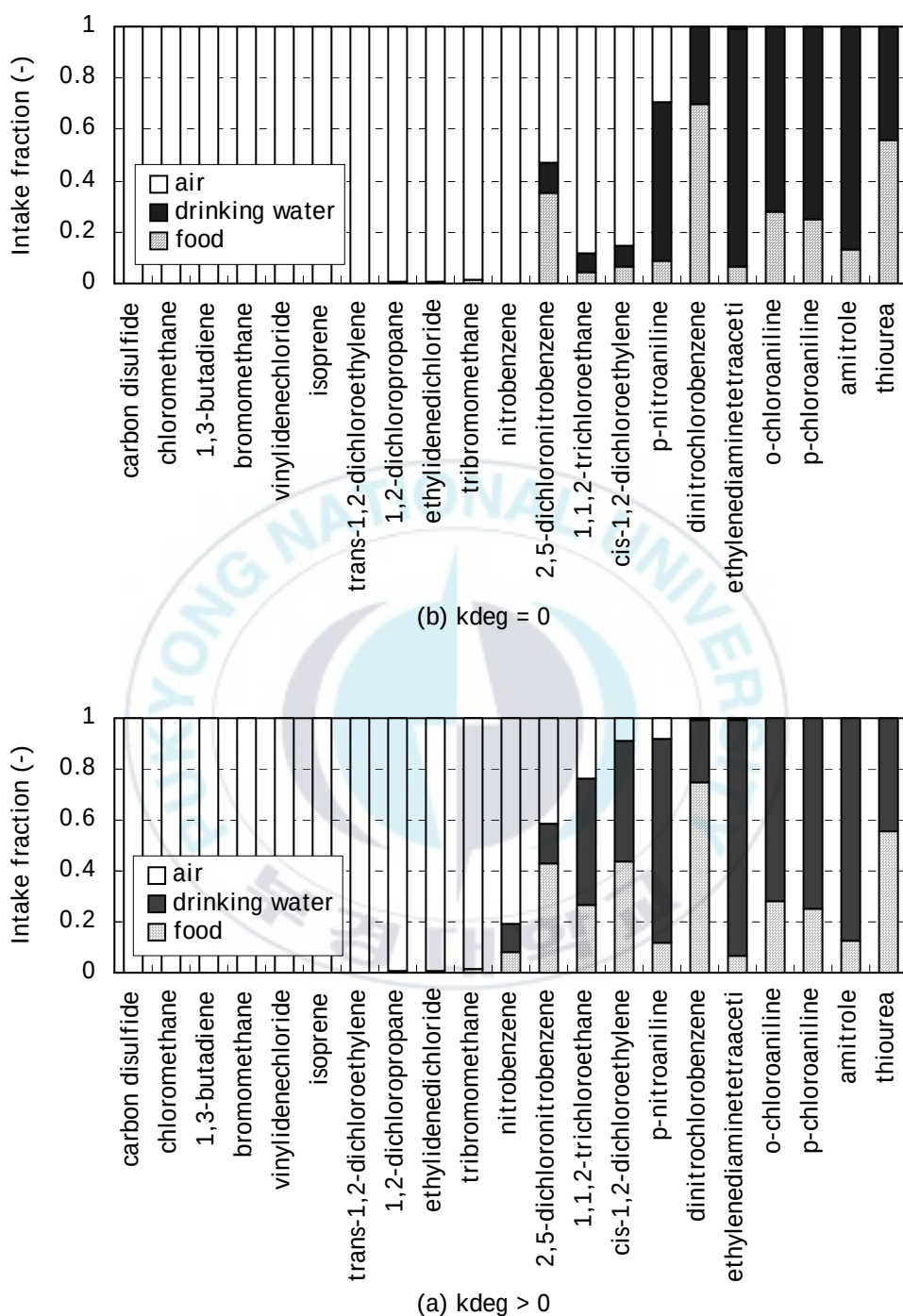


Fig. 24. Intake fraction of 21 chemical substances per exposure pathway for model predictions in Regional area.

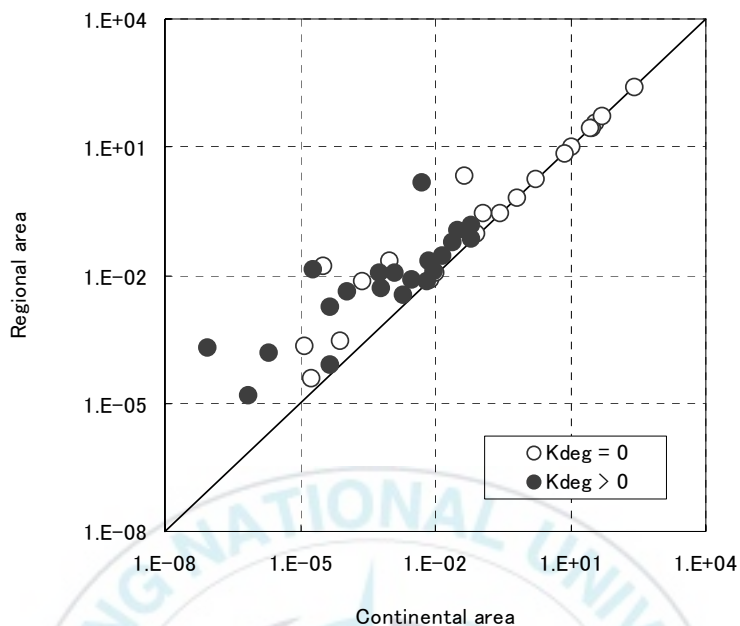


Fig. 25. Comparison of daily intake per capita between in Regional area and Continental area ($\mu\text{g/kg/day}$).

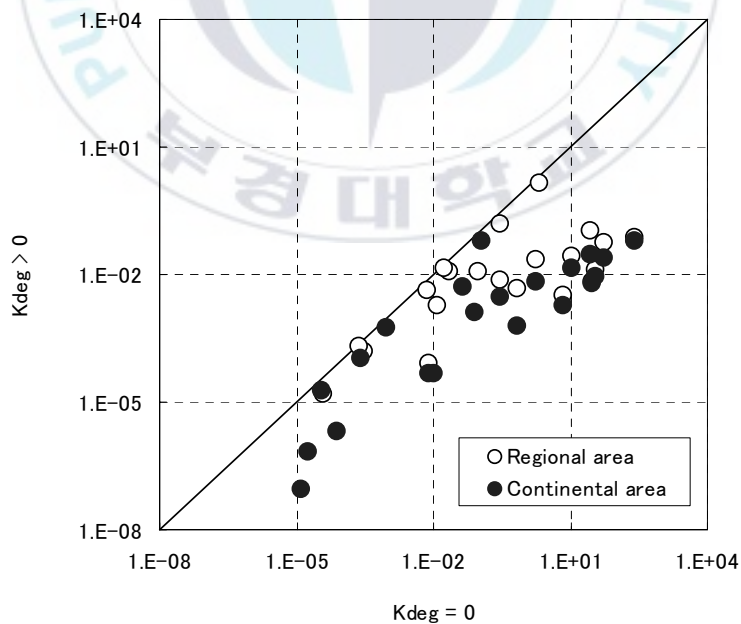


Fig. 26. Comparison of daily intake per capita according to degradation rate ($\mu\text{g/kg/day}$).

2.2.2 노출량으로부터의 screening

생분해가 일어나기 어려운 물질인 제2종감시화학물질을 분해가 일어나지 않는 것으로 가정한 Case 1의 경우를 노출량으로 취하고자 한다. Regional area, Continental area 모두 $10\mu\text{g/kg/day}$ 이상의 1일 섭취량을 갖는 것으로 계산된 물질은 chloromethane, 1,3-butadiene, vinylidenechloride, trans-1,2-dichloroethylene, carbon disulfide이다. 그리고 $10\mu\text{g/kg/day}$ 미만인 물질중 Regional area, Continental area 모두 $1\mu\text{g/kg/day}$ 이상의 일일섭취량인 것으로 계산된 물질은 isoprene, bromomethane이며, Regional area만이 $1\mu\text{g/kg/day}$ 이상의 일일섭취량을 갖는 것으로 계산된 물질은 thiourea이었다. thiourea을 제외한 나머지는 전부 공기 흡입으로 부터의 노출이 많은 것으로 여겨지는 물질이다(Fig. 25). Case 1의 경우, p-nitroaniline, ethylenediaminetetraacetic acid, o-chloroaniline, p-chloroaniline, amitrole는 주로 음용수에 의한 섭취량이 높게 나타났으며, dinitrochlorobenzene, thiourea는 대부분이 어패류를 포함하는 음식물에 의한 섭취로 나타났다.

제2종감시화학물질중 임의로 선택한 21종에 대하여 MUSEM을 이용해 노출 평가를 행하였다. PRTR대상물질에 해당하지 않지만 제2종감시화학물질중에서는 위해성이 높은 물질이 존재하기 때문에 어떠한 방법으로든 배출량을 산정할 필요가 있다. 일본의 화학물질심사규제법에 근거하는 제2종감시화학물질은 독성, 제조 수입량 등의 신고데이터나 開放系用出荷量데이터가 존재함으로 이러한 수치나 화학물질의 Life cycle의 각 단계 Production (생산단계), Formulation (제조단계), Processing (가공단계), Private use (이용단계), Recovery (회수단계)에 따른 배출 시나리오를 이용하여 배출량을 산정하는 기법의 개발이 필요하다. 또한 수치모델의 결과치를 실측치와 비교하여 모델의 당위성을 검증할 필요가 있다.

IV. 화학물질 위해성평가를 위한 관리우선순위 결정

국내 화학물질관리를 위한 위해성평가기 필요한 관리우선순위 결정기법에 POT를 도입하고, 본 연구에서 개발한 MUSEM을 이용한 노출가능성 평가결과와 결합하여 관리우선순위 결정시스템을 구축하였다. MUSEM은 62종의 화학물질에 대하여 일본 47개 지역의 환경매체중 농도예측 및 동경지역에 대한 민감도 분석을 실시하였으며, 21종 화학물질에 대한 인간 섭취량 평가 등을 통하여 모델의 적용성을 검토하였다.

본 장에서는 적용성이 검토된 MUSEM으로 산정된 환경매체중 화학물질 농도를 기반으로 POT와 결합하여 부산지역에 대한 화학물질 관리우선순위를 결정하였다.

1. 다매체환경모델에 의한 노출가능성 평가

위해성평가기 필요한 부산지역의 화학물질 노출가능성을 평가하기 위한 MUSEM의 입력인자는 Table 17과 같다.

Table 17. Input data of environmental characteristics for estimation of chemical exposure using MUSEM

Regional area	Busan
Continental area	Korea except Regional area
Substance	174 Chemicals including toluene
Emission load	Chemical emission database by TRI result
Atmospheric mixing height (m)	1000
Fresh water depth (m)	3
Sea Water depth (m)	25
Depth of natural soil (m)	0.05
Depth of agricultural soil (m)	0.2
Depth of urban or industrially used soil (m)	0.05
Temperature (°C)	12
Wind speed (m/sec)	3

1.1 모델입력자료 산정

1.1.1 대상지역 선정

대상지역은 부산을 Regional area로 설정하였으며, 대한민국 전국토 면적에서 부산지역을 제외한 면적을 Continental area로 설정하였다. 부산은 한국의 대부분의 대도시에서와 같이, 1960년대 이후 급속한 산업화, 도시화를 거쳐 2001년 현재 365여만명의 대도시로 성장하였으나 각종 환경오염이 사회적인 문제로 대두되고 있다. 부산의 인구는 1914년 최초의 府制 실시 당시 2만명을 조금 넘었으나 지역확장과 항만의 발달로 점차 증가하였으며 1950년 한국전쟁이후 전국 각지의 피난민이 몰려들고 임시수도가 부산으로 옮겨오면서 급증하게 되었다. 정부가 서울로 환도해 간 이후 둔화되던 부산의 인구성장은 정부 직할시로 승격된 1963년을 기점으로 급속한 경제성장 및 도시화와 더불어 400만명을 초과하였으나 1991년 이후 국내 산업의 위축과 수출부진으로 인한 공장이전 및 부산권 배후지역으로의 인구유출 등의 이유로 인구의 정체 내지 감소추세가 계속증가 속도가 둔화되기 시작하여 현재에 이르고 있다(부산광역시, 1998; 부산광역시, 2003).

낙동강을 중심으로 동부 구릉성 산지와 서부 평야지대로 구성된 부산의 토지현황은 배산임해 도시로서 평지가 적은데 비해, 지목별 토지이용 현황에서도 임야 면적이 367.3km²으로 전체의 절반 정도를 차지하는 등 이용할 수 있는 면적이 제한되어 있다.

연구 대상지역으로 선정된 부산(Regional area)과 Continental area를 위한 환경매체의 면적은 건설교통부(2002년)의 지목별 토지현황을 이용하여 Table 18과 같이 인구와 총면적, 지표수 면적비, 그리고 도시·산업용지, 자연토양, 농지 등의 토양 분포비, 하수도 보급률 등 MUSEM의 입력인자를 산정하여 모델에 적용하였다. 지목별 토지이용 현황에서 임야는 자연지로, 전, 답, 과수원, 목장용지는 농지 면적으로, 하천, 구거, 유지, 양어장, 광천지, 수도용지는 육수역의 수표면적으로 산정하였으며, 그 외의 지목은 도시·산업용지로 계산하였다(Table 19). 하수도 보급률은 Continental area의 경우 전국의 하수도보급률을 적용하였다(환경부, 2002).

Table 18. Input data of regional characteristics for estimation of chemical exposure using MUSEM

Content		Busan	Korea
Population (eq)		3,655,437	45,985,289
Rate of sewage supply (%)		77.8	73.2
Area of Land Category(km ²)		762 (100%)	99,538 (100%)
Water surface	River	43	2,801
	Ditch	15	1,756
	Marsh	1 (8.2%)	1,103 (5.7%)
	Mineral spring site	0	0
	Water reservoirs	3	35
Agriculture soil	Dry paddy field	24	8,099
	Rice paddy field	99 (16.6%)	12,326 (21.6%)
	Orchard	2	540
	Pasture	2	556
Natural soil	Forest field	367 (48.2%)	65,100 (65.4%)
Urban/Industrial soil	Saltern	0	117
	Building land	96	2,387
	Factory site	17	534
	School site	10	244
	Road	41	2,337
	Railway	3	118
	Bank	2 (27.0%)	173 (7.3%)
	Park	5	67
	Sporting facility site	2	125
	Recreation area	2	16
	Religious site	1	28
	Historical site	0	10
	Grave yard	3	277
	Miscellaneous area	24	788

Table 19. The land classification for estimation of soil and fresh water area in Korea

Division	The classification of land category
Freshwater	River, Ditch, Marsh, Mineral spring site, Water reservoirs
Soil	
Natural Soil	Forest field
Agricultural soil	Paddy field, Dry paddy field, Orchard, Pasture
Industrial/urban soil	The others

1.1.2 대상물질 선정

본 연구에서 구축된 다매체환경모델 MUSEM의 대상물질은 환경부의 2002년 화학물질 배출량 조사(TRI; Toxic Release Inventory, 2004) 결과에 근거하여 Table 20과 같이 총 178종의 화학물질을 대상으로 하였다(환경부, 2004a; 환경부, 2004b).

TRI는 산업 활동의 각 단계에서 환경으로 배출되는 화학물질의 양(배출량)과 폐기물처리업체, 하수처리장 또는 폐수위탁처리업체 등에 이동되는 화학물질의 양(이동량)을 사업자 스스로 파악하여 보고하고 정부는 이를 목록화하여 자료로서 제공하는 제도이다. 이렇게 배출량 및 이동량을 보고하도록 함으로써 기업체는 자발적으로 화학물질 배출과정과 정도를 인지하게 되어 생산제품 원료의 사용절감을 통한 생산성 향상과 배출량 저감을 통해 환경보전을 꾀할 수 있게 되고, 정부는 효율적인 화학물질 관리정책수립의 기초자료로 활용할 수 있게 된다. 아울러 국민은 기업체에서 배출되는 화학물질의 양과 종류를 인지하게 되어 위해정도에 따라 배출저감을 위한 간접적 압력을 가할 수 있고 정책 건의 자료로 활용할 수 있게 되는 것이다.

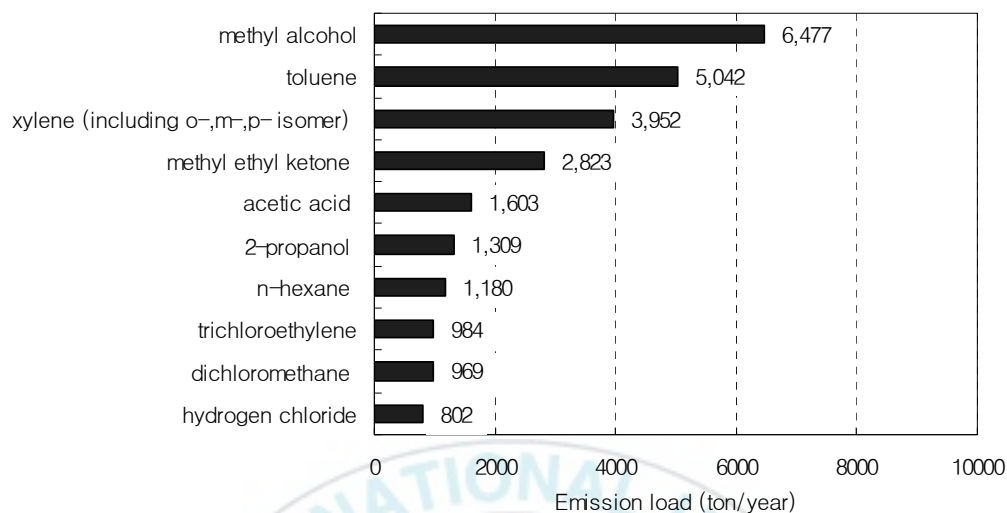
미국에서는 유해물질 배출 조사(TRI)를 1987년부터 시행하였으며 OECD에서는 오염물질 배출 및 이동 등록(PRTR; Pollutants Release and Transfer Register) 제도를 1996년부터 시행하도록 회원국에 권고하였다. 우리나라는 1996년 OECD 가입시 오염물질 배출 및 이동 등록(PRTR)제도 이행을 약속하여 1996년 유해물질 관리법령을 개정함으로써 법적 근거를 마련하게 되었으며 업종별로 배출량 산정 지침을 개발하여 1999년부터 본격적으로 조사를 실시하게 되었다.

환경부는 연구용역사업으로 환경배출량 산정지침이 개발됨에 따라 1999년 1월 화학물질 배출량조사 및 산정계수에 관한 규정(환경부고시 1998-155호)을 고시하고 2월에 조사대상업체를 선정, 대상업체를 중심으로 배출량산정지침 및 조사표 작성방법 등에 대한 교육을 실시 한 후 2000년 2월말까지 조사표를 작성하여 관할기관에 보고토록 하는 환경배출량 조사를 시행하였다. 조사대상 업체는 제조·사용량이 연간 50톤이상인 대기, 수질 배출시설을 허가를 받은 석유정제, 화학업종의 사업장으로 총종업원수가 100인 이상인 270여개 업체를 대상으로 하였으며, 조사대상 화학물질은 유독물 및 국제기구에서 발암성을 유발하는 등의 유해물질중 1996년 화학물질유통량조사(환경부) 결과 국내에서 사용량이 비교적 많은 Formaldehyde 등 80종의 물질을 선정하였다. 현재 우리나라의 TRI는 일부 업종의

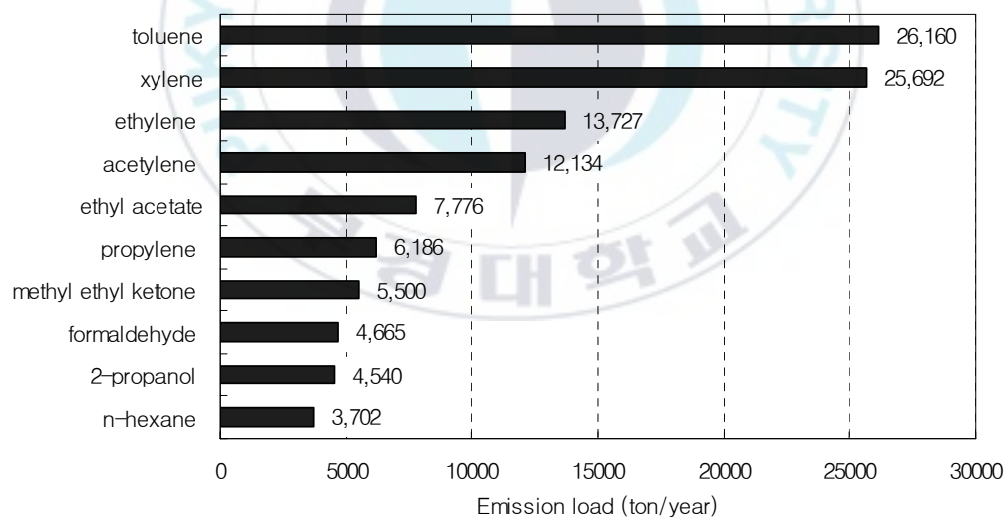
기업에 대해서만 적용하는 시행초기에 있으며, 적용대상을 점진적으로 확대할 계획이다. 유해화학물질의 배출원은 크게 일정규모이상의 기업(점오염원)과 비점오염원으로 나눌 수 있다. 일본의 경우 1998년도 PRTR시범사업결과 점오염원에서 배출되는 양이 전체배출량의 77%를 차지하고 비점오염원에서 배출량이 23%를 차지하는 것으로 밝혀졌다. 따라서 기업에 대해서 기존의 계획을 보완하여 지속적으로 추진하고 비점오염원에 대해서 향후 시행방안을 연구하고 기반기술을 갖추어 본격 시행함으로써 우리나라의 유해화학물질의 배출량을 완전히 파악할 수 있는 체계를 완비할 계획이다.

유해화학물질관리법시행령 제11조의 2에 의하여 배출량 조사대상물질은 유독물, 관찰물질, 대기·수질오염물질 및 국제기구에서 지정한 발암성·생식독성 또는 유전독성물질로 유독물 및 관찰물질의 지정기준에 해당하는 화학물질 등 총 640여종이며 대상물질중 화학물질 유통량 조사결과를 근거로 비교적 유통량이 많은 물질을 중심으로 보고대상 화학물질을 정하여 2001년 이후부터 매년 100여종 정도 확대하고, 보고기준도 연간 50톤에서 점진적으로 강화하여 차후 국내에서 사용되고 있는 조사대상물질에 대하여 OECD 수준으로 배출량이 파악되도록 할 계획에 있다.

본 연구에 2002년 적용된 대상물질은 신고대상인 점오염원의 경우 배출량의 99.6%가 대기로 배출되며, 나머지는 물환경(0.4%) 및 토양으로 배출되는 것으로 나타났으며, 물질별로는 유독물인 methyl alcohol (18.9%), toluene (14.7%), xylene (11.5%) 등 휘발성이 높은 물질의 배출이 많았으며, 상위 10개 물질이 총 배출량의 73.4%를 차지하였다(Fig. 27). 환경총배출량(점오염원+비점오염원)에서 79%를 차지하는 비점오염원의 경우도 전체 배출량(자동차, 농약 등)의 97.0%가 대기로 배출되며, 나머지는 토양으로 배출되고 있으며, 물질별로는 toluene (18.4%), xylene (18.0%), ethylene (9.6%) 등 휘발성이 높은 물질이 많이 배출되는 것으로 나타났다(Fig. 27).



(a) Limitations of reported releases and transfers



(b) Limitations of estimated releases from outside notification

Fig. 27. Top 10 of the emission load in Limitations of reported releases and transfers (point sources) and Limitations of estimated releases from outside notification (non-point sources).

1.1.3 화학물질 배출량 산정

MUSEM에 입력된 지역별(Regional area와 Continental area) 환경매체별(대기, 물, 토양)로 유입되는 화학물질 배출량 산정을 위해 2002년도 TRI의 결과를 이용하였다. 환경매체로 유입되는 화학물질의 총 배출량은 연간 제조·사용량이 50톤 이상으로 배출량 신고대상 물질(점오염원)과 50톤 이하 및 자동차, 도장, 농약 등 소비·유통 단계의 비점오염원의 배출량을 합산하여 산정하였으며, 보다 상세한 산정법은 다음과 같다.

가. 점오염원

자동차산업이나 1차 금속산업 등의 28개 업종으로 대기·수질배출시설 설치 허가(신고)를 받은 업체 중 종업원이 50인 이상으로 methyl alcohol, toluene, xylene 등 240개 물질 중 연간 제조·사용량이 50톤 이상인 물질에 대해서는 유해화학물질관리법 제14조 및 같은 법 시행규칙 제9조(환경부고시 제2001-40호)와 통계법 제8조 및 같은 법 시행령 제9조(통계청승인 제10613호)에 의해, 화학물질 배출량조사(TRI) 제도에 따라 산업활동의 각 단계에서 화학물질이 환경으로 배출되는 양과 폐기물 등에 함유되어 이동되는 양을 사업자 스스로 파악·보고하고 정부는 이를 목록화하여 제공하도록 되어 있다.

이때 화학물질은 대기, 물, 토양으로의 배출량 및 폐수 및 폐기물 처리업체를 이용하는 이동량으로 구분하며, 2002년도에는 차단형 및 관리형매립지로 배출되어 환경매체에 노출되지 않는 양이 토양배출량에서부터 분리되어 자가매립량으로 산정된다.

그러므로 MUSEM의 모델링을 위한 환경매체(대기, 물, 토양)로 유입되는 화학물질의 양을 산정하기위해 Fig. 28과 같이,

① 「수계」로 배출되는 화학물질의 경우는 해당 수계별로 배출경로를 나누었다. 낙동강수계, 한강수계 등과 같이 하천인 경우는 육수역으로, 부산남해나 경남 동해 등과 같이 해역인 경우는 해수역으로 배출되는 것으로 구분한 후 각각의 물환경(육수역, 해수역)으로 배출되는 화학물질량을 분리 산정하였다.

: 하천 → 육수역, 해역 → 해수역의 배출량으로 분리

② 2002년도부터 적용된 자가매립량은 「차단형 및 관리형매립지」로 배출

되어 사업장내 관리형 또는 차단형 매립지에 매립되는 양으로 실제 환경매체에 노출되지 않는 양이므로 토양 배출량 산정에서 제외하였다.

③ 「이동량」 중 폐기물로 이동된 화학물질은 재활용(73%), 정제(10%), 매립(5%)순으로 처리되고 있어, 배출량 산정에서 제외하였다.

④ 또한 「이동량」 중 폐수로 이동되는 화학물질은 주로 산업단지 폐수종말처리장 또는 폐수공동처리장에서 종합처리(물리+화학+생물)되고 있으므로 하수처리장으로 유입되는 양으로 산정하였으며, 이는 MUSEM내에 삽입된 SimpleTreat 모델을 이용하여 하수처리장에서 대기, 물환경, 토양 등 환경매체로 배출되는 화학물질의 양을 다시 산정하도록 하였다.

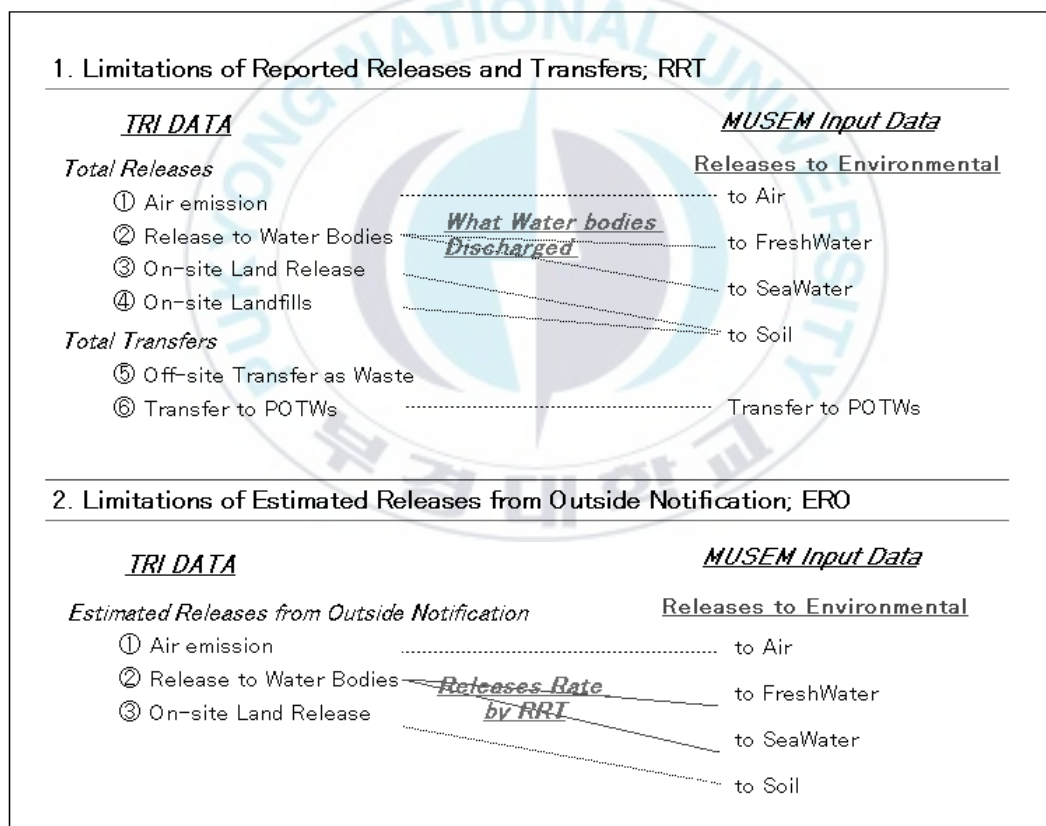


Fig. 28. Calculation method of the emission to each compartment in MUSEM using the TRI data.

나. 비점오염원

유해화학물질은 제품의 제조뿐만 아니라 유통·소비 등 전 과정에 걸쳐 다양한 경로를 통하여 환경에 배출되고 있으므로, 화학물질의 배출원, 배출량 등 배출 실태를 전체적으로 파악해서는 산업체만(점원)이 아닌 농약, 도로상 이동 배출원 등 비점오염원에 대한 배출량을 구하여야 한다. 특히 2002년도의 조사 결과에 의하면, 미국이나 일본과 같이 비점오염원에서 배출되는 화학물질량이 점오염원보다 3.7배나 많이 배출되고 있는 것을 알 수 있다.

MUSEM에 적용할 비점원에 의한 환경매체(대기, 물, 토양)로 유입되는 화학물질량의 산정은 Fig. 28과 같이,

① 비점오염원의 「물환경」 부분은 각각의 식 (36)과 (37)에서 구한 배출분율 $Emission Rate_{freshwater}$ 와 $Emission Rate_{seawater}$ 을 곱하여 MUSEM입력을 위한 육수역과 해수역 각각의 배출량을 구한다.

이렇게 계산되어 MUSEM에 입력된 환경매체별 배출량은 Table 20과 같다. TRI 자료결과에 따르면, 연구대상지역 Regional area으로 선정된 부산의 경우, toluene이 1680.9ton/day로 가장 많이 배출되고 있는 것으로 나타났으며, 다음으로 xylene (1619.6ton/day), sodium hydroxide (1263.6ton/day) 등의 순위였으며, 배출량이 많은 상위 10개의 화학물질과 각 매체별 배출량은 Table 21에 나타내었다.

1.2 환경매체중 화학물질 농도예측

MUSEM을 이용하여 예측한 환경매체중의 화학물질 농도는 Table 22와 같으며, 각 매체별 화학물질의 분포율은 Fig. 29에 나타내었다. 이때 사용된 환경매체의 용적은 Table 23의 입력인자를 이용하여 산정하였다.

Table 20. Input data of chemical emission volumes to each environmental compartments using TRI data

Chemicals name	No CAS No.	Regional area (kg/day)					Continental area (kg/day)						
		Air	Fresh water	Sea water	Agri. soil	Urban /ind. soil	STP	Air	Fresh water	Sea water	Agri. soil	Urban /ind. soil	STP
phosphorus oxychloride	1 10025-87-3	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	5
hydrobromic acid	2 10035-10-6	0	0	0	0	0	0	9	0	0	0	0	0
ethylbenzene	3 100-41-4	206	0	0	0	0	0	3,423	0	0	0	0	0
styrene	4 100-42-5	602	0	0	0	0	1	7,889	2	0	0	1	4
2-vinylpyridine	5 100-69-6	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
4,4' -methylenebis[2-chloroaniline]	6 101-14-4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
diphenylmethane diisocyanate	7 101-68-8	0	0	0	0	0	0	9	0	0	0	0	15
4,4'-methylenedianiline	8 101-77-9	0	0	0	0	0	0	5	0	0	0	0	0
tributylamine	9 102-82-9	15	0	0	0	0	0	183	0	0	0	0	0
di(2-ethylhexyl) adipate	10 103-23-1	0	0	0	0	0	0	26	0	0	0	0	9
epichlorohydrin	11 106-89-8	13	0	0	0	0	0	129	0	0	0	0	0
butane	12 106-97-8	661	0	0	0	0	0	10,402	3	0	0	0	0
1-butene	13 106-98-9	143	0	0	0	0	0	2,338	0	0	0	0	0
1,3-butadiene	14 106-99-0	184	0	0	0	0	0	3,118	0	0	0	0	0
acrolein	15 107-02-8	121	0	0	0	0	0	1,669	0	0	0	0	0
1,2-dichloroethane	16 107-06-2	0	0	0	0	0	0	195	0	0	0	0	0
acrylonitrile	17 107-13-1	14	0	0	0	0	0	1,167	1	0	0	0	21
propargyl alcohol	18 107-19-7	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0
vinyl acetate	19 108-05-4	33	0	0	0	0	0	757	1	0	0	0	0
toluene	20 108-88-3	4,602	0	0	0	0	3	80,854	24	3	0	0	103
cyclohexylamine	21 108-91-8	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
phenol	22 108-95-2	4	0	0	0	0	21	213	0	0	0	0	39
2-methoxyethanol	23 109-86-4	1	0	0	0	0	0	53	0	0	0	0	0

Table 20. Input data of chemical emission volumes to each environmental compartments using TRI data
(continued)

Chemicals name	No CAS No.	Regional area (kg/day)					Continental area (kg/day)						
		Air	Fresh water	Sea water	Agri. soil	Urban /ind. soil	STP	Air	Fresh water	Sea water	Agri. soil	Urban /ind. soil	STP
diethylamine	24 109-89-7	15	0	0	0	0	0	177	0	0	0	0	0
n-hexane	25 110-54-3	660	0	0	0	0	0	12,712	2	0	0	0	39
2-butyne-1,4-diol	26 110-65-6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
2-ethoxyethanol	27 110-80-5	52	0	0	0	0	0	436	0	0	0	0	0
cyclohexane	28 110-82-7	19	0	0	0	0	0	796	2	0	0	0	22
2-ethoxyethyl acetate	29 111-15-9	367	0	0	0	0	0	6,238	0	0	0	0	0
glutaraldehyde	30 111-30-8	6	0	0	0	0	0	72	0	0	0	0	0
cetyltrimethylammonium chloride	31 112-02-7	0	0	0	0	0	5	0	0	0	0	0	65
propylene	32 115-07-1	1,260	0	0	0	0	0	17,337	0	0	0	0	0
endosulfan	33 115-29-7	0	0	0	0	0	52	121	0	0	0	453	619
dicofol	34 115-32-2	0	0	0	0	0	0	6	0	0	0	21	0
decabromodiphenyl oxide	35 1163-19-5	0	0	0	0	0	17	1	0	0	0	0	200
di(2-ethylhexyl) phthalate	36 117-81-7	3	0	0	0	0	18	344	1	0	0	0	221
cyclonite	37 121-82-4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
fenitrothion	38 122-14-5	1	0	0	0	1	0	275	0	0	0	199	0
1,4-dioxane	39 123-91-1	0	0	0	0	0	0	32	0	0	0	0	0
dimethylamine	40 124-40-3	3	0	0	0	0	0	40	0	0	0	0	0
tetrachloroethylene	41 127-18-4	1	0	0	0	0	0	1,306	0	0	0	0	1
butylated hydroxytoluene	42 128-37-0	0	0	0	0	0	15	5	0	0	0	0	183
xylenol	43 1300-71-6	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0
potassium hydroxide	44 1310-58-3	0	0	0	0	0	263	6	0	0	0	0	4,255
sodium hydroxide	45 1310-73-2	32	0	0	0	0	3,430	182	0	0	0	0	149,573

Table 20. Input data of chemical emission volumes to each environmental compartments using TRI data
(continued)

Chemicals name	No CAS No.	Regional area (kg/day)					Continental area (kg/day)						
		Air	Fresh water	Sea water	Agri. soil	Urban /ind. soil	STP	Air	Fresh water	Sea water	Agri. soil	Urban /ind. soil	STP
phosphorus pentoxide	46 1314-56-3	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	69
phosphamidon	47 13171-21-6	0	0	0	0	0	0	305	0	0	0	566	0
ethoprophos	48 13194-48-4	0	0	0	0	0	0	18	0	0	0	336	0
cresol(including o-,m-,p- isomer)	49 1319-77-3	32	0	0	0	0	0	585	0	0	0	0	0
xylylene(including o-,m-,p- isomer)	50 1330-20-7	4,432	0	0	0	0	5	76,763	19	2	0	0	873
captan	51 133-06-2	0	0	0	0	0	0	38	0	0	0	143	0
folpet	52 133-07-3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4
fenbutatin oxide	53 13356-08-6	0	0	0	0	0	0	4	0	0	0	16	0
ammonium bifluoride	54 1341-49-7	0	0	0	0	0	0	7	0	0	0	0	49
thiram	55 137-26-8	0	0	0	0	0	0	61	0	0	0	114	0
ethyl acrylate	56 140-88-5	118	0	0	0	0	0	1,512	3	0	0	0	2
ethyl acetate	57 141-78-6	1,090	0	0	0	0	0	24,607	1	0	0	0	100
cartap	58 15263-53-3	2	0	0	0	8	101	421	0	0	0	1,574	1,211
carbofuran	59 1563-66-2	3	0	0	0	11	0	604	0	0	0	2,258	0
methyl tert-butyl ether	60 1634-04-4	595	0	0	0	0	0	9,716	0	0	0	0	0
edifenphos	61 17109-49-8	0	0	0	0	1	2	57	0	0	0	213	18
benomyl	62 17804-35-2	0	0	0	0	1	0	124	0	0	0	464	0
chlorothalonil	63 1897-45-6	0	0	0	0	0	3	792	0	0	0	574	38
paraquat salt	64 1910-42-5	0	0	0	0	0	72	4	0	0	0	0	859
2-thiopheneacetonitrile	65 20893-30-5	0	0	0	0	0	0	16	3	0	0	0	0
molinate	66 2212-67-1	4	0	0	0	3	0	837	0	0	0	606	0
propargite	67 2312-35-8	0	0	0	0	0	0	58	0	0	0	42	0

Table 20. Input data of chemical emission volumes to each environmental compartments using TRI data
(continued)

Chemicals name	No CAS No.	Regional area (kg/day)					Continental area (kg/day)						
		Air	Fresh water	Sea water	Agri. soil	Urban /ind. soil	STP	Air	Fresh water	Sea water	Agri. soil	Urban /ind. soil	STP
thiophanate-methyl	68 23564-05-8	0	0	0	0	0	8	0	0	0	0	0	95
triazophos	69 24017-47-8	0	0	0	0	0	0	7	0	0	0	13	0
dinitrotoluene	70 25321-14-6	0	0	0	0	0	0	29	0	0	0	0	0
iprobensos	71 26087-47-8	6	0	0	0	11	33	1,190	0	0	0	2,209	393
chlorpyrifos	72 2921-88-2	0	0	0	0	0	5	85	0	0	0	206	64
phorate	73 298-02-2	0	0	0	0	0	2	12	0	0	0	215	29
hydrazine	74 302-01-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	33
acephate	75 30560-19-1	0	0	0	0	0	0	51	0	0	0	95	0
diazinon	76 333-41-5	1	0	0	0	1	23	123	0	0	0	253	279
isophorone diisocyanate	77 4098-71-9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
formaldehyde	78 50-00-0	979	0	0	0	0	1	12,433	6	1	0	0	97
urethane	79 51-79-6	0	0	0	0	0	0	12	0	0	0	0	0
zeta cypermethrin	80 52315-07-8	0	0	0	0	0	2	1	0	0	0	2	21
bronopol	81 52-51-7	0	0	0	0	0	4	0	0	0	0	0	53
trichlorfon	82 52-68-6	0	0	0	0	0	4	0	0	0	0	0	50
decamethrin	83 52918-63-5	0	0	0	0	0	0	5	0	0	0	19	0
fenthion	84 55-38-9	0	0	0	0	1	0	66	0	0	0	123	0
carbon tetrachloride	85 56-23-5	0	0	0	0	0	0	14	0	0	0	0	0
parathion	86 56-38-2	0	0	0	0	1	0	16	0	0	0	128	0
toluene 2,4-diisocyanate	87 584-84-9	0	0	0	0	0	9	48	0	0	0	0	105
dimethoate	88 60-51-5	0	0	0	0	0	0	22	0	0	0	40	0
methyl disulfide	89 624-92-0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0

Table 20. Input data of chemical emission volumes to each environmental compartments using TRI data
(continued)

Chemicals name	No CAS No.	Regional area (kg/day)					Continental area (kg/day)						
		Air	Fresh water	Sea water	Agri. soil	Urban /ind. soil	STP	Air	Fresh water	Sea water	Agri. soil	Urban /ind. soil	STP
aniline	90 62-53-3	0	0	0	0	0	0	5	0	0	0	0	1
thiourea	91 62-56-6	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	19
dichlorvos	92 62-73-7	0	0	0	0	0	32	623	0	0	0	451	378
acetic acid	93 64-19-7	7	0	0	0	0	49	702	0	0	0	0	70
diethyl sulfate	94 64-67-5	0	0	0	0	0	2	1	0	0	0	0	19
furathiocarb	95 65907-30-4	0	0	0	0	0	2	5	0	0	0	19	22
methyl alcohol	96 67-56-1	626	0	0	0	0	0	22,817	82	9	0	1	768
2-propanol	97 67-63-0	626	0	0	0	0	3	15,356	37	4	0	0	1,227
chloroform	98 67-66-3	0	0	0	0	0	0	66	0	0	0	0	0
mercaptoacetic acid	99 68-11-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3
n,n-dimethylformamide	100 68-12-2	33	0	0	0	0	0	1,949	1	0	0	0	420
cyfluthrin	101 68359-37-5	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	4	0
benzene	102 71-43-2	505	0	0	0	0	0	8,595	1	0	0	0	123
1,1,1-trichloroethane	103 71-55-6	25	0	0	0	0	0	691	0	0	0	0	4
lead and its compounds	104 7439-92-1	5	0	0	0	0	381	54	2	0	0	0	4,558
manganese and its compounds	105 7439-96-5	5	0	0	0	0	49	232	47	5	0	0	597
nickel and its compounds	106 7440-02-0	0	0	0	0	0	4	9	0	0	0	0	73
tin and its compounds	107 7440-31-5	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	19
antimony and its compounds	108 7440-36-0	0	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	1
arsenic and its compounds	109 7440-38-2	0	0	0	0	0	4	0	0	0	0	0	52
barium and its compounds	110 7440-39-3	0	0	0	0	0	132	24	0	0	0	0	1,581
boron and its compounds	111 7440-42-8	0	0	0	0	0	8	9	0	0	0	0	94

Table 20. Input data of chemical emission volumes to each environmental compartments using TRI data
(continued)

Chemicals name	No CAS No.	Regional area (kg/day)					Continental area (kg/day)						
		Air	Fresh water	Sea water	Agri. soil	Urban /ind. soil	STP	Air	Fresh water	Sea water	Agri. soil	Urban /ind. soil	STP
cadmium and its compounds	112 7440-43-9	0	0	0	0	0	2	1	0	0	0	0	27
chromium and its compounds	113 7440-47-3	2	0	0	0	0	579	10	7	1	0	0	207
copper and its compounds	114 7440-50-8	7	0	0	0	0	0	107	8	1	0	25	154
zinc and its compounds	115 7440-66-6	7	1	0	0	0	25	884	30	3	0	0	320
ethylene	116 74-85-1	2,710	0	0	0	0	0	36,218	0	0	0	0	0
acetylene	117 74-86-2	2,500	0	0	0	0	0	30,745	0	0	0	0	0
methyl chloride	118 74-87-3	0	0	0	0	0	0	7	0	0	0	0	0
vinyl chloride	119 75-01-4	0	0	0	0	0	0	1,762	0	0	0	0	2
acetaldehyde	120 75-07-0	347	0	0	0	0	0	4,489	3	0	0	0	0
dichloromethane	121 75-09-2	16	0	0	0	0	0	2,923	4	0	0	0	85
carbon disulfide	122 75-15-0	0	0	0	0	0	0	5	0	0	0	0	71
ethylene oxide	123 75-21-8	0	0	0	0	0	0	128	8	1	0	0	1
carbonyl chloride	124 75-44-5	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
propylene oxide	125 75-56-9	0	0	0	0	0	0	94	12	1	0	0	0
trichloroacetic acid	126 76-03-9	1	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0
hydrogen chloride	127 7647-01-0	157	0	0	0	0	121	2,159	4	0	0	0	2,661
hydrogen fluoride	128 7664-39-3	3	0	0	0	0	2	294	0	0	0	0	1,578
ammonia	129 7664-41-7	40	0	0	0	0	0	1,123	0	0	0	0	1,061
sulfuric acid	130 7664-93-9	2	0	0	0	0	597	712	0	0	0	0	5,637
sodium fluoride	131 7681-49-4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
nitric acid	132 7697-37-2	156	0	0	0	0	4	1,076	0	0	0	0	570
sulfur	133 7704-34-9	0	0	0	0	0	77	252	0	0	0	0	926

Table 20. Input data of chemical emission volumes to each environmental compartments using TRI data
(continued)

Chemicals name	No CAS No.	Regional area (kg/day)					Continental area (kg/day)						
		Air	Fresh water	Sea water	Agri. soil	Urban /ind. soil	STP	Air	Fresh water	Sea water	Agri. soil	Urban /ind. soil	STP
thionyl chloride	134 7719-09-7	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0
phosphorus trichloride	135 7719-12-2	0	0	0	0	0	0	7	0	0	0	0	0
hydrogen peroxide	136 7722-84-1	26	0	0	0	0	20	461	6	1	0	0	3,910
phosphorus	137 7723-14-0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
bromine	138 7726-95-6	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
sodium chlorite	139 7758-19-2	0	0	0	0	0	0	0	4	0	0	0	1
dimethyl sulfate	140 77-78-1	0	0	0	0	0	0	37	0	0	0	0	228
selenium and its compounds	141 7782-49-2	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
chlorine	142 7782-50-5	27	7	1	0	0	0	158	0	0	0	0	0
hydrogen sulfide	143 7783-06-4	0	0	0	0	0	0	517	0	0	0	0	0
chlorosulfonic acid	144 7790-94-5	0	0	0	0	0	0	13	1	0	0	0	0
hydroxylamine	145 7803-49-8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
hydrazine hydroxide	146 7803-57-8	0	0	0	0	0	0	4	2	0	0	0	0
2-methylpropanenitrile	147 78-82-0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
methyl ethyl ketone	148 78-93-3	691	0	0	0	0	0	22,108	2	0	0	0	646
trichloroethylene	149 79-01-6	138	1	0	0	0	0	2,680	0	0	0	0	0
acrylamide	150 79-06-1	0	0	0	0	0	1	13	0	0	0	0	8
chloroacetic acid	151 79-11-8	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	7
6PPD	152 793-24-8	0	0	0	0	0	0	7	0	0	0	0	0
4,4'-bisphenol A	153 80-05-7	0	0	0	0	0	0	12	0	0	0	0	0
oleum	154 8014-95-7	0	0	0	0	0	0	15	0	0	0	0	0
saccharin	155 81-07-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3

Table 20. Input data of chemical emission volumes to each environmental compartments using TRI data
(continued)

Chemicals name	No CAS No.	Regional area (kg/day)					Continental area (kg/day)						
		Air	Fresh water	Sea water	Agri. soil	Urban /ind. soil	STP	Air	Fresh water	Sea water	Agri. soil	Urban /ind. soil	STP
hexamethylene diisocyanate	156 822-06-0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
benfuracarb	157 82560-54-1	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	9	0
butylbenzyl phthalate	158 85-68-7	0	0	0	0	0	117	2	0	0	0	0	1,399
azinphos-methyl	159 86-50-0	184	0	0	0	0	0	2,544	0	0	0	13	0
1-chloro-2-nitrobenzene	160 88-73-3	0	0	0	0	0	2	7	0	0	0	0	29
dinitrobutyl phenol	161 88-85-7	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
3,3'-dichlorobenzidine	162 91-94-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2,4-D	163 94-75-7	0	0	0	0	0	0	5	0	0	0	8	0
o-toluidine	164 95-53-4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2
2,4-diaminotoluene	165 95-80-7	0	0	0	0	0	0	45	1	0	0	0	44
1,3-dichloro-2-propanol	166 96-23-1	0	0	0	0	0	0	5	0	0	0	0	0
dithiopyr	167 97886-45-8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2-furanmethanol	168 98-00-0	0	0	0	0	0	0	50	0	0	0	0	0
furfural	169 98-01-1	0	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0
(trichloromethyl)benzene	170 98-07-7	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	0
fosthiazate	171 98886-44-3	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	24	0
nitrobenzene	172 98-95-3	0	0	0	0	0	0	7	0	0	0	0	0
4-nitrotoluene	173 99-99-0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
cyanide compounds	174 -	0	0	0	0	0	0	79	2	0	0	0	73

Table 21. Top 20 ranking from TRI data (point source and non-point source) in Busan (kg/day)

Chemicals name	Total	Air	Fresh water	Sea water	Agri. soil	Urban /ind. soil	STP
toluene	4,605	4,602	0	0	0	0	3
xylene (including o-,m-,p- isomer)	4,437	4,432	0	0	0	0	5
sodium hydroxide	3,462	32	0	0	0	0	3,430
ethylene	2,710	2,710	0	0	0	0	0
acetylene	2,500	2,500	0	0	0	0	0
propylene	1,260	1,260	0	0	0	0	0
ethyl acetate	1,091	1,090	0	0	0	0	0
formaldehyde	980	979	0	0	0	0	1
methyl ethyl ketone	691	691	0	0	0	0	0
butane	661	661	0	0	0	0	0
n-hexane	660	660	0	0	0	0	0
2-propanol	629	626	0	0	0	0	3
methyl alcohol	627	626	0	0	0	0	0
styrene	602	602	0	0	0	0	1
sulfuric acid	600	2	0	0	0	0	597
methyl tert-butyl ether	595	595	0	0	0	0	0
chromium and its compounds	582	2	0	0	0	0	579
benzene	505	505	0	0	0	0	0
lead and its compounds	386	5	0	0	0	0	381
2-ethoxyethyl acetate	367	367	0	0	0	0	0

Table 22. Computed chemical concentration of multimedia environments in Busan using MUSEM

No.	Chemicals name	Air (ug/m ³)	Water (ug/L)			Soil (ug/kg)			Sediment (ug/kg)	
			fresh	sea	natural	agricultural	urban/ Industrial	fresh	sea	
1	phosphorus oxychloride	4E-18	0.001	9E-07	1E-09	9E-10	1E-09	0.0006	5E-07	
2	hydrobromic acid	3E-16	0.002	5E-06	5E-08	3E-08	5E-08	0.0013	3E-06	
3	ethylbenzene	0.042	0.0002	8E-05	0.0039	0.0035	0.0039	0.0015	0.0005	
4	styrene	0.1164	0.0008	0.0001	0.0002	0.0006	0.0002	0.0044	0.0006	
5	2-vinylpyridine	4E-07	7E-07	6E-08	8E-07	4E-07	8E-07	7E-07	6E-08	
6	4,4' -methylenebis[2-chloroaniline]	5E-08	0.0003	6E-07	0.0015	0.0004	0.0015	0.0132	3E-05	
7	diphenylmethane diisocyanate	4E-05	0.0021	8E-06	0.0009	0.2859	0.0009	0.9257	0.0028	
8	4,4'-methylenedianiline	3E-09	7E-05	4E-07	0.0004	0.0002	0.0004	7E-05	5E-07	
9	tributylamine	0.0011	9E-05	2E-05	0.0003	9E-05	0.0003	0.0043	0.0006	
10	di(2-ethylhexyl) adipate	4E-05	0.0003	3E-06	0.0085	0.0241	0.0085	0.184	0.001	
11	epichlorohydrin	0.0019	0.0032	0.0003	0.0013	0.0012	0.0013	0.002	0.0002	
12	butane	0.1254	6E-06	1E-06	4E-05	4E-05	4E-05	2E-05	4E-06	
13	1-butene	0.0142	6E-07	3E-07	5E-06	5E-06	5E-06	1E-06	6E-07	
14	1,3-butadiene	0.0397	6E-06	3E-06	2E-05	2E-05	2E-05	9E-06	5E-06	
15	acrolein	0.0211	0.0053	0.0019	0.0012	0.0009	0.0012	0.0032	0.0011	
16	1,2-dichloroethane	0.0015	5E-05	3E-05	5E-05	5E-05	5E-05	4E-05	3E-05	
17	acrylonitrile	0.0067	0.0015	0.0006	0.0004	0.0004	0.0004	0.0009	0.0004	

Table 22. Computed chemical concentration of multimedia environments in Busan using MUSEM (*continued*)

No.	Chemicals name	Air ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Water ($\mu\text{g}/\text{L}$)			Soil ($\mu\text{g}/\text{kg}$)			Sediment ($\mu\text{g}/\text{kg}$)		
			fresh	sea	natural	agricultural	urban/ Industrial	fresh	sea	fresh	sea
18	propargyl alcohol	2E-05	0.0003	4E-06	0.0001	8E-05	0.0001	0.0002	2E-06		
19	vinyl acetate	0.0079	0.0003	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0002	8E-05		
20	toluene	1.0188	0.0088	0.0034	0.0599	0.1061	0.0599	0.0346	0.0126		
21	cyclohexylamine	5E-07	1E-05	1E-07	3E-05	1E-05	3E-05	1E-05	9E-08		
22	phenol	0.0007	0.4308	0.0002	0.0418	0.067	0.0418	0.3915	0.0002		
23	2-methoxyethanol	0.0003	0.0246	6E-05	0.0075	0.0069	0.0075	0.0142	4E-05		
24	diethylamine	0.0011	0.0018	0.0001	0.0009	0.0006	0.0009	0.0011	1E-04		
25	n-hexane	0.1219	8E-06	1E-06	0.0002	0.0002	0.0002	0.0002	1E-05		
26	2-butyne-1,4-diol	7E-13	0.002	6E-07	2E-08	6E-07	2E-08	0.0011	3E-07		
27	2-ethoxyethanol	0.0065	0.5672	0.0012	0.1402	0.1277	0.1402	0.3324	0.0007		
28	cyclohexane	0.0085	8E-06	2E-06	6E-05	6E-05	6E-05	9E-05	2E-05		
29	2-ethoxyethyl acetate	0.0478	0.4899	0.0061	0.3204	0.218	0.3204	0.3137	0.004		
30	glutaraldehyde	0.0006	0.0183	9E-05	0.0084	0.0065	0.0084	0.0108	5E-05		
31	cetyltrimethylammonium chloride	2E-15	0.177	4E-05	3E-08	0.3071	3E-08	1.5227	0.0003		
32	propylene	0.2433	4E-06	2E-06	3E-05	3E-05	3E-05	4E-06	2E-06		
33	endosulfan	0.0063	7.63	0.0046	0.1087	20.14	0.1087	332.43	0.2134		
34	dicofol	7E-06	0.0005	4E-06	0.0478	0.012	0.0478	0.0331	0.0001		

Table 22. Computed chemical concentration of multimedia environments in Busan using MUSEM (*continued*)

No.	Chemicals name	Air (ug/m ³)	Water (ug/L)			Soil (ug/kg)			Sediment (ug/kg)	
			fresh	sea	natural	agricultural	urban/ Industrial	fresh	sea	
35	decabromodiphenyl oxide	2E-06	0.5336	0.0002	0.0336	171.65	0.0336	1320.9	0.9828	
36	di(2-ethylhexyl) phthalate	0.0021	0.0605	0.0002	2.0834	218.32	2.0834	62.208	0.1252	
37	cyclonite	2E-14	0.0001	4E-08	7E-10	6E-10	7E-10	0.0001	3E-08	
38	fenitrothion	3E-07	0.2292	0.0003	3.3218	0.9843	12.22	2.8662	0.0029	
39	1,4-dioxane	7E-05	0.0007	1E-05	0.0002	0.0002	0.0002	0.0004	8E-06	
40	dimethylamine	0.0004	3E-07	1E-07	9E-08	9E-08	9E-08	2E-07	8E-08	
41	tetrachloroethylene	0.0101	5E-05	2E-05	0.0008	0.0041	0.0008	0.0008	0.0002	
42	butylated hydroxytoluene	0.0008	0.0158	6E-05	0.0007	24.128	0.0244	5.7402	0.0174	
43	xlenol	2E-06	2E-05	3E-07	5E-05	2E-05	5E-05	3E-05	7E-07	
44	potassium hydroxide	9E-23	9.3993	0.002	1E-11	7E-06	1E-11	5.3936	0.0012	
45	sodium hydroxide	1E-11	140.34	0.0333	1.9613	1.6066	1.9613	80.529	0.0196	
46	phosphorus pentoxide	2E-19	0.2013	4E-05	4E-11	2E-07	4E-11	0.1155	2E-05	
47	phosphamidon	8E-11	2.0951	0.0009	0.0002	0.0002	0.0002	1.449	0.0006	
48	ethoprophos	3E-09	0.0556	3E-05	0.0056	0.0016	0.0139	0.8674	0.0004	
49	cresol (including o-,m-,p- isomer)	0.0031	0.0346	0.0004	0.139	0.05	0.139	0.0484	0.0006	
50	xylene (including o-,m-,p- isomer)	0.9933	0.0097	0.0027	0.1097	0.4107	0.1097	0.0701	0.0175	
51	captan	5E-05	3E-06	2E-07	0.0006	0.0002	0.0006	8E-06	4E-07	

Table 22. Computed chemical concentration of multimedia environments in Busan using MUSEM (*continued*)

No.	Chemicals name	Air ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Water ($\mu\text{g}/\text{L}$)			Soil ($\mu\text{g}/\text{kg}$)			Sediment ($\mu\text{g}/\text{kg}$)	
			fresh	sea	natural	agricultural	urban/ Industrial	fresh	sea	
52	folpet	1E-08	0.1384	2E-05	0.0006	0.0478	0.0006	0.8082	9E-05	
53	fenbutatin oxide	2E-07	3E-05	4E-07	0.001	0.0003	0.001	0.0806	0.0019	
54	ammonium bifluoride	2E-21	0.01	8E-06	5E-11	2E-10	5E-11	0.0057	5E-06	
55	thiram	0.0001	0.0582	7E-05	0.0106	0.0029	0.0514	0.0688	8E-05	
56	ethyl acrylate	0.0173	0.0011	0.0003	0.001	0.0006	0.001	0.0009	0.0003	
57	ethyl acetate	0.212	0.0514	0.0124	0.0261	0.0214	0.0261	0.0339	0.0084	
58	cartap	2E-09	70.368	0.0083	0.1459	0.1337	2.163	41.753	0.005	
59	carbofuran	0.0114	0.032	0.0006	0.0062	0.0039	29.261	0.0767	0.0013	
60	methyl tert-butyl ether	0.1266	0.0076	0.0034	0.004	0.0039	0.004	0.0053	0.0024	
61	edifenphos	9E-06	0.891	0.0002	0.4832	0.5463	7.9605	15.588	0.0024	
62	benomyl	1E-08	3.7282	0.0008	0.2034	0.1391	3.0052	6.3312	0.0014	
63	chlorothalonil	0.0029	1.3342	0.0007	1.1459	1.0703	1.4468	11.948	0.0063	
64	paraquat salt	9E-16	43.145	0.0044	9E-08	2E-05	9E-08	25.435	0.0027	
65	2-thiopheneacetonitrile	5E-05	0.0038	1E-05	0.0009	0.0005	0.0009	0.0031	8E-06	
66	molinate	0.0016	0.178	0.0003	0.1735	0.0487	20.143	1.8862	0.0032	
67	propargite	3E-05	0.0052	4E-05	0.1768	0.0445	0.1768	1.8497	0.0128	
68	thiophanate-methyl	3E-10	5.6881	0.0004	0.0001	0.028	0.0001	5.2252	0.0004	

Table 22. Computed chemical concentration of multimedia environments in Busan using MUSEM (*continued*)

No.	Chemicals name	Air ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Water ($\mu\text{g}/\text{L}$)			Soil ($\mu\text{g}/\text{kg}$)			Sediment ($\mu\text{g}/\text{kg}$)	
			fresh	sea	natural	agricultural	urban/ Industrial	fresh	sea	
69	triazophos	4E-11	0.0045	8E-06	0.0003	9E-05	0.0003	0.0754	0.0001	
70	dinitrotoluene	0.0002	0.003	3E-05	0.0072	0.003	0.0072	0.006	6E-05	
71	iprobefos	0.0007	18.317	0.0025	2.9003	7.7318	78.153	246.72	0.0304	
72	chlorpyrifos	3E-05	0.6103	0.0002	0.3761	13.284	0.3761	246.65	0.1119	
73	phorate	8E-06	0.0433	2E-05	0.0001	0.2412	0.4375	0.6426	0.0002	
74	hydrazine	3E-07	0.0004	6E-07	2E-06	1E-06	2E-06	0.0002	3E-07	
75	acephate	5E-16	0.0013	4E-06	5E-06	3E-06	0.0009	0.0008	2E-06	
76	diazinon	0.0077	0.0109	4E-05	6E-05	0.3009	0.0809	0.3543	0.0011	
77	isophorone diisocyanate	2E-07	3E-05	7E-08	4E-07	0.0049	4E-07	0.0049	1E-05	
78	formaldehyde	0.1419	0.0091	0.004	0.0022	0.0019	0.0022	0.0056	0.0025	
79	urethane	2E-05	0.0051	7E-06	0.0018	0.0014	0.0018	0.003	4E-06	
80	zeta cypermethrin	4E-07	0.0472	2E-05	0.0136	15.489	0.0136	116.87	0.0864	
81	bronopol	2E-13	0.1523	3E-05	1E-07	5E-05	1E-07	0.0884	2E-05	
82	trichlorfon	2E-19	0.0637	2E-05	1E-10	0.0007	1E-10	0.0417	1E-05	
83	decamethrin	7E-06	0.0002	3E-06	0.1064	0.0267	0.2015	0.3594	0.0066	
84	fenthion	9E-07	0.051	7E-05	1.4414	0.38	11.426	2.8252	0.0033	
85	carbon tetrachloride	0.0002	3E-07	2E-07	2E-06	2E-06	2E-06	1E-06	8E-07	

Table 22. Computed chemical concentration of multimedia environments in Busan using MUSEM (*continued*)

No.	Chemicals name	Air ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Water ($\mu\text{g}/\text{L}$)			Soil ($\mu\text{g}/\text{kg}$)			Sediment ($\mu\text{g}/\text{kg}$)		
			fresh	sea	natural	agricultural	urban/ Industrial	fresh	sea	fresh	sea
86	parathion	2E-08	0.0128	1E-05	0.0324	0.0085	5.1238	0.4325	0.0004		
87	toluene 2,4-diisocyanate	0.001	0.0849	0.0003	0.0018	3.4601	0.0018	2.425	0.0067		
88	dimethoate	6E-10	0.2851	9E-05	0.0001	1E-04	0.0001	0.1891	6E-05		
89	methyl disulfide	1E-07	3E-09	2E-09	6E-09	4E-09	6E-09	4E-09	2E-09		
90	aniline	3E-05	0.0003	3E-06	0.0005	0.0004	0.0005	0.0002	2E-06		
91	thiourea	2E-18	0.0254	9E-06	1E-10	9E-06	1E-10	0.0146	5E-06		
92	dichlorvos	0.003	0.0145	4E-05	0.0292	0.0299	0.0663	0.0138	3E-05		
93	acetic acid	0.004	0.8239	0.0009	0.025	0.0185	0.025	0.4705	0.0005		
94	diethyl sulfate	6E-06	0.0058	5E-06	8E-06	0.0007	8E-06	0.0044	4E-06		
95	furathiocarb	0.0002	0.0008	3E-06	2E-08	0.0013	4E-06	0.1347	0.0004		
96	methyl alcohol	0.1377	0.2882	0.0154	0.2917	0.2002	0.2917	0.1616	0.0088		
97	2-propanol	0.1092	0.2369	0.0093	0.4021	0.2525	0.4021	0.1417	0.0057		
98	chloroform	0.0005	5E-06	3E-06	1E-05	1E-05	1E-05	7E-06	4E-06		
99	mercaptoacetic acid	2E-09	0.0044	1E-06	2E-06	1E-05	2E-06	0.0025	8E-07		
100	n,n-dimethylformamide	0.0065	0.3262	0.0013	0.0797	0.0648	0.0797	0.1883	0.0008		
101	cyfluthrin	2E-06	6E-05	1E-06	0.0121	0.003	0.0121	0.1405	0.0066		
102	benzene	0.1099	0.0007	0.0004	0.0021	0.0021	0.0021	0.0013	0.0008		

Table 22. Computed chemical concentration of multimedia environments in Busan using MUSEM (*continued*)

No.	Chemicals name	Air ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Water ($\mu\text{g}/\text{L}$)			Soil ($\mu\text{g}/\text{kg}$)		Sediment ($\mu\text{g}/\text{kg}$)	
			fresh	sea	natural	agricultural	urban/ Industrial	fresh	sea
103	1,1,1-trichloroethane	0.0087	0.0002	1E-05	0.0001	0.0011	0.0001	0.0006	4E-05
104	lead and its compounds	4E-08	230.52	0.0236	0.7895	0.8162	0.7895	156.94	0.0164
105	manganese and its compounds	4E-13	2.4902	0.0005	0.4872	0.3617	0.4872	1.5138	0.0003
106	nickel and its compounds	2E-08	0.1865	4E-05	0.0203	0.0163	0.0203	0.1085	2E-05
107	tin and its compounds	3E-13	0.0559	1E-05	4E-07	0.0017	4E-07	0.0457	9E-06
108	antimony and its compounds	4E-12	0.0018	3E-06	4E-06	3E-06	4E-06	0.0012	2E-06
109	arsenic and its compounds	0.0007	0.0008	4E-06	8E-08	3E-06	8E-08	0.0006	3E-06
110	barium and its compounds	3E-09	4.5938	0.0009	0.0027	0.0126	0.0027	2.7925	0.0006
111	boron and its compounds	3E-16	0.273	6E-05	4E-08	0.0006	4E-08	0.166	4E-05
112	cadmium and its compounds	3E-10	0.0832	2E-05	0.0034	0.0027	0.0034	0.0493	1E-05
113	chromium and its compounds	2E-10	19.385	0.0035	0.2244	0.2114	0.2244	11.784	0.0021
114	copper and its compounds	5E-09	1.0706	9E-05	0.483	0.3853	0.5161	0.6225	5E-05
115	zinc and its compounds	5E-09	2.3449	0.0007	0.5322	0.4227	0.5322	1.3672	0.0004
116	ethylene	0.3733	7E-07	4E-07	4E-05	4E-05	4E-05	5E-07	3E-07
117	acetylene	0.459	7E-05	4E-05	7E-05	7E-05	7E-05	4E-05	3E-05
118	methyl chloride	7E-05	5E-08	3E-08	3E-08	3E-08	3E-08	3E-08	2E-08
119	vinyl chloride	0.028	7E-06	6E-06	1E-05	1E-05	1E-05	7E-06	6E-06
120	acetaldehyde	0.0493	0.0225	0.0035	0.0076	0.0054	0.0076	0.0132	0.0021

Table 22. Computed chemical concentration of multimedia environments in Busan using MUSEM (*continued*)

No.	Chemicals name	Air ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Water ($\mu\text{g}/\text{L}$)			Soil ($\mu\text{g}/\text{kg}$)			Sediment ($\mu\text{g}/\text{kg}$)		
			fresh	sea	natural	agricultural	urban/ Industrial	fresh	sea	fresh	sea
121	dichloromethane	0.0232	0.0007	0.0003	0.0004	0.0004	0.0004	0.0006	0.0003		
122	carbon disulfide	0.0006	1E-05	2E-06	4E-06	4E-06	4E-06	2E-05	4E-06		
123	ethylene oxide	0.0008	0.0005	0.0001	1E-04	8E-05	1E-04	0.0003	6E-05		
124	carbonyl chloride	4E-06	2E-10	2E-11	1E-09	4E-10	1E-09	9E-11	1E-11		
125	propylene oxide	0.0006	0.0003	6E-05	6E-05	5E-05	6E-05	0.0002	4E-05		
126	trichloroacetic acid	7E-05	0.008	1E-05	0.0066	0.0044	0.0066	0.007	1E-05		
127	hydrogen chloride	0.0311	0.1676	0.0035	0.0034	0.017	0.0034	0.1064	0.0023		
128	hydrogen fluoride	4E-09	0.843	0.0003	0.3424	0.2516	0.3424	0.5125	0.0002		
129	ammonia	0.0038	0.0005	0.0002	2E-05	6E-06	2E-05	0.0003	9E-05		
130	sulfuric acid	2E-07	20.985	0.0044	0.1422	0.1167	0.1422	12.049	0.0026		
131	sodium fluoride	2E-35	6E-05	1E-07	2E-18	2E-18	2E-18	4E-05	8E-08		
132	nitric acid	1E-09	21.464	0.0007	15.358	11.32	15.358	13.021	0.0004		
133	sulfur	8E-18	2.7553	0.0007	2E-08	0.0002	2E-08	1.5857	0.0004		
134	thionyl chloride	1E-05	3E-07	1E-07	1E-07	1E-07	1E-07	2E-07	1E-07		
135	phosphorus trichloride	7E-05	3E-07	7E-08	3E-07	3E-07	3E-07	5E-07	1E-07		
136	hydrogen peroxide	0.0028	1.6805	0.0012	0.164	0.1343	0.164	0.9663	0.0007		
137	phosphorus	5E-06	1E-05	7E-08	3E-09	4E-08	3E-09	6E-06	4E-08		
138	bromine	6E-06	1E-07	5E-08	6E-08	5E-08	6E-08	8E-08	4E-08		

Table 22. Computed chemical concentration of multimedia environments in Busan using MUSEM (*continued*)

No.	Chemicals name	Air ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Water ($\mu\text{g}/\text{L}$)			Soil ($\mu\text{g}/\text{kg}$)			Sediment ($\mu\text{g}/\text{kg}$)	
			fresh	sea	natural	agricultural	urban/ Industrial	fresh	sea	
139	sodium chlorite	4E-25	0.006	3E-06	3E-14	2E-14	3E-14	0.0034	2E-06	
140	dimethyl sulfate	0.0003	0.0148	5E-05	0.0005	0.0004	0.0005	0.009	3E-05	
141	selenium and its compounds	4E-06	5E-06	2E-08	2E-09	3E-08	2E-09	3E-06	2E-08	
142	chlorine	0.005	0.0412	0.0002	1E-06	1E-06	1E-06	0.0281	0.0001	
143	hydrogen sulfide	0.011	1E-06	7E-07	2E-06	2E-06	2E-06	7E-07	4E-07	
144	chlorosulfonic acid	3E-05	0.0064	1E-05	0.0021	0.0016	0.0021	0.0038	6E-06	
145	hydroxylamine	5E-07	6E-06	1E-07	1E-06	1E-06	1E-06	3E-06	8E-08	
146	hydrazine hydroxide	3E-05	0.003	8E-06	0.0002	0.0002	0.0002	0.0017	5E-06	
147	2-methylpropanenitrile	5E-08	6E-08	6E-09	8E-09	6E-09	8E-09	4E-08	4E-09	
148	methyl ethyl ketone	0.1553	0.087	0.01	0.0555	0.0457	0.0555	0.0532	0.0063	
149	trichloroethylene	0.0364	0.0088	0.0001	0.0008	0.0008	0.0008	0.0245	0.0004	
150	acrylamide	9E-08	0.0019	2E-06	0.0004	0.0004	0.0004	0.0011	9E-07	
151	chloroacetic acid	2E-08	0.1984	3E-05	5E-05	0.0001	5E-05	0.1205	2E-05	
152	6PPD	1E-06	3E-05	3E-07	0.0003	6E-05	0.0003	0.0051	4E-05	
153	4,4'-bisphenol A	4E-09	0.0497	3E-05	0.0081	0.0279	0.0081	0.6456	0.0004	
154	oleum	5E-05	0.0047	1E-05	0.0012	0.001	0.0012	0.0027	7E-06	
155	saccharin	2E-05	4E-05	1E-07	2E-09	2E-07	2E-09	3E-05	1E-07	
156	hexamethylene diisocyanate	8E-07	4E-07	6E-08	1E-06	3E-07	1E-06	3E-06	5E-07	

Table 22. Computed chemical concentration of multimedia environments in Busan using MUSEM (*continued*)

No.	Chemicals name	Air (ug/m ³)	Water (ug/L)			Soil (ug/kg)			Sediment (ug/kg)	
			fresh	sea	natural	agricultural	urban/ Industrial	fresh	sea	
157	benfuracarb	6E-07	0.0014	3E-06	0.0106	0.0027	0.0106	0.1317	0.0003	
158	butylbenzyl phthalate	8E-05	0.6073	0.0003	0.0367	332.43	0.0367	70.095	0.0222	
159	azinphos-methyl	1E-05	49.532	0.0038	524.74	220.32	524.74	232.87	0.0175	
160	1-chloro-2-nitrobenzene	0.0003	0.2369	0.0002	0.0026	0.0583	0.0026	0.5078	0.0003	
161	dinitrobutyl phenol	3E-06	0.0003	1E-06	0.0021	0.0006	0.0021	0.0039	1E-05	
162	3,3'-dichlorobenzidine	1E-12	5E-06	1E-09	4E-08	2E-08	4E-08	0.0001	2E-08	
163	2,4-D	5E-08	0.0266	1E-05	0.0517	0.0184	0.4089	0.1382	5E-05	
164	o-toluidine	2E-06	0.0019	1E-06	1E-05	0.0001	1E-05	0.0016	9E-07	
165	2,4-diaminotoluene	2E-06	0.0003	6E-07	0.0005	0.0005	0.0005	0.0003	6E-07	
166	1,3-dichloro-2-propanol	6E-05	0.0017	1E-05	0.0007	0.0006	0.0007	0.0011	8E-06	
167	dithiopyr	6E-08	3E-06	2E-08	5E-05	1E-05	0.0041	0.0003	1E-06	
168	2-furanmethanol	2E-05	0.0044	8E-06	0.0018	0.0013	0.0018	0.0027	5E-06	
169	furfural	8E-06	5E-05	1E-06	2E-05	1E-05	2E-05	3E-05	9E-07	
170	(trichloromethyl)benzene	3E-07	1E-11	1E-12	6E-08	2E-08	6E-08	5E-10	5E-11	
171	fosthiazate	1E-09	0.0529	1E-05	0.0003	0.0002	0.0569	0.0598	1E-05	
172	nitrobenzene	4E-05	0.0001	9E-06	0.0002	0.0001	0.0002	0.0002	1E-05	
173	4-nitrotoluene	9E-06	2E-06	8E-07	9E-06	4E-06	9E-06	6E-06	2E-06	
174	cyanide compounds	0.0005	0.0007	9E-05	0.0001	9E-05	0.0001	0.0004	6E-05	

Table 23. Parameters of environmental compartment in MUSEM

Parameters	value
Volume of air (m^3)	1.52×10^{12}
Volume of freshwater (m^3)	1.86×10^8
Volume of seawater (m^3)	1.90×10^{10}
Volume of natural soil (m^3)	1.84×10^7
Volume of agricultural soil (m^3)	2.53×10^7
Volume of urban or industrially used soil (m^3)	1.03×10^7
Volume of sediment of freshwater (m^3)	1.86×10^6
Volume of sediment of seawater (m^3)	2.29×10^7

2. 노출가능성과 부분순서이론에 의한 관리우선순위 결정

국내 화학물질관리를 위한 위해성평가지 필요한 관리우선순위 결정기법에 POT를 도입하여, 본 연구에서 개발한 MUSEM을 이용한 노출가능성 평가결과와 결합하였다. POT에 적용할 노출가능성은 MUSEM의 모델링 수행 결과에 따른 전 환경매체중 화학물질농도로 표현하고자한다. 그리고 POT는 순위를 결정함에 있어서 가중치나 점수배점은 이용하지 않으므로 모든 순위결정대상(본 연구의 각 매체별 화학물질 농도)은 동일한 가중치를 가진다고 볼 수 있다. 또한 POT는 인간과 생태계환경에 미치는 화학물질의 영향이 부정적일수록 상위순위를 차지하여 관리 우선대상으로 평가하므로, 농도가 높은 화학물질일수록 상위 순위를 차지한다.

MUSEM으로 추정된 부산지역의 환경매체중 화학물질 농도를 이용하여 POT를 적용시켰으며, 이때의 object는 TRI 자료에서 이용 가능한 174종의 화학물질을, descriptor는 8가지의 환경매체 중의 농도(즉, 대기, 육수역 물환경, 해수역 물환경, 자연지, 농지, 도시·산업용지, 육수역 저질, 해수역 저질중 화학물질 농도)를 설정하였다(Table 24).

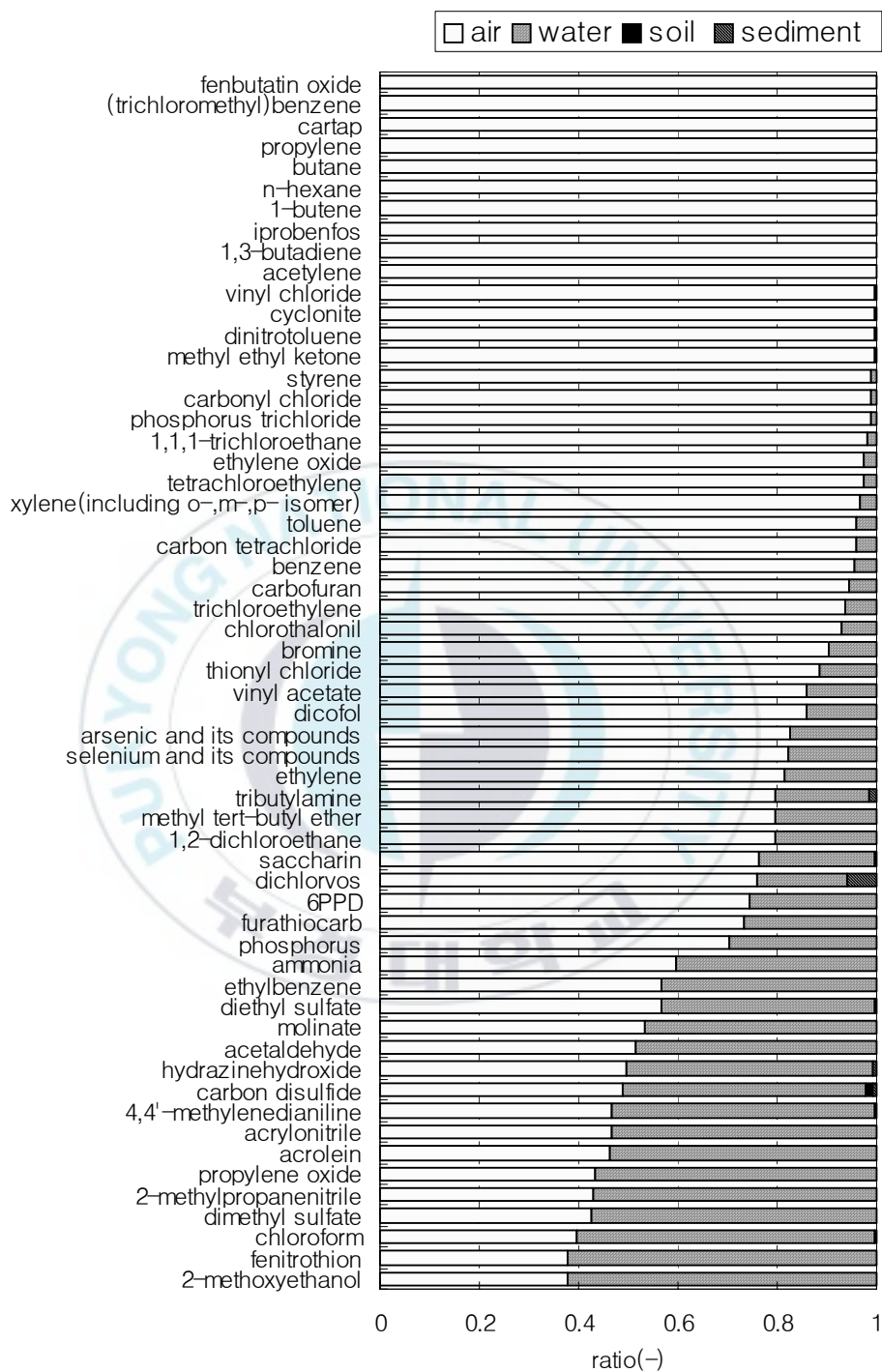


Fig. 29. Mass distribution ratios of chemicals in four environmental media.

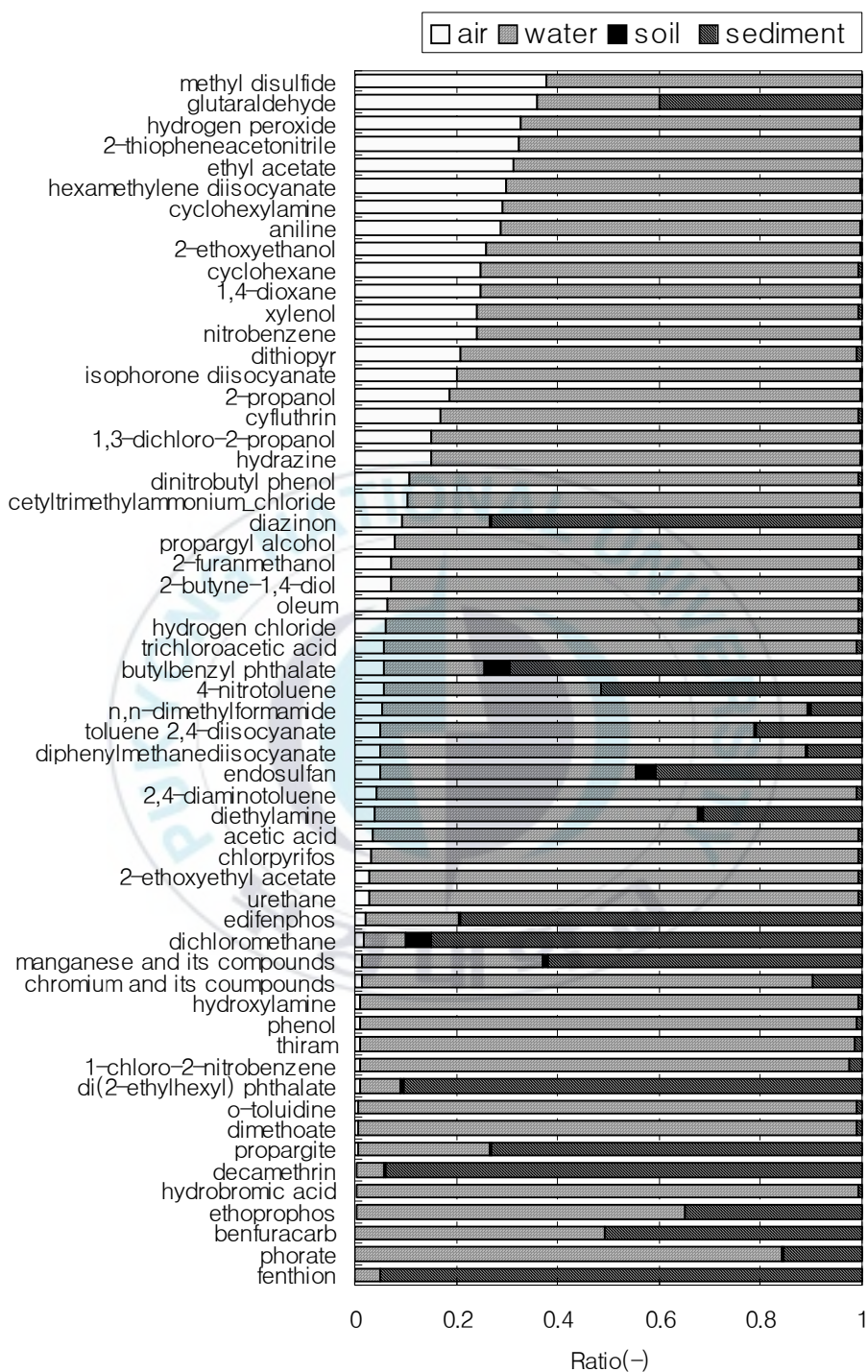


Fig. 29. Mass distribution ratios of chemicals in four environmental media (*continued*).

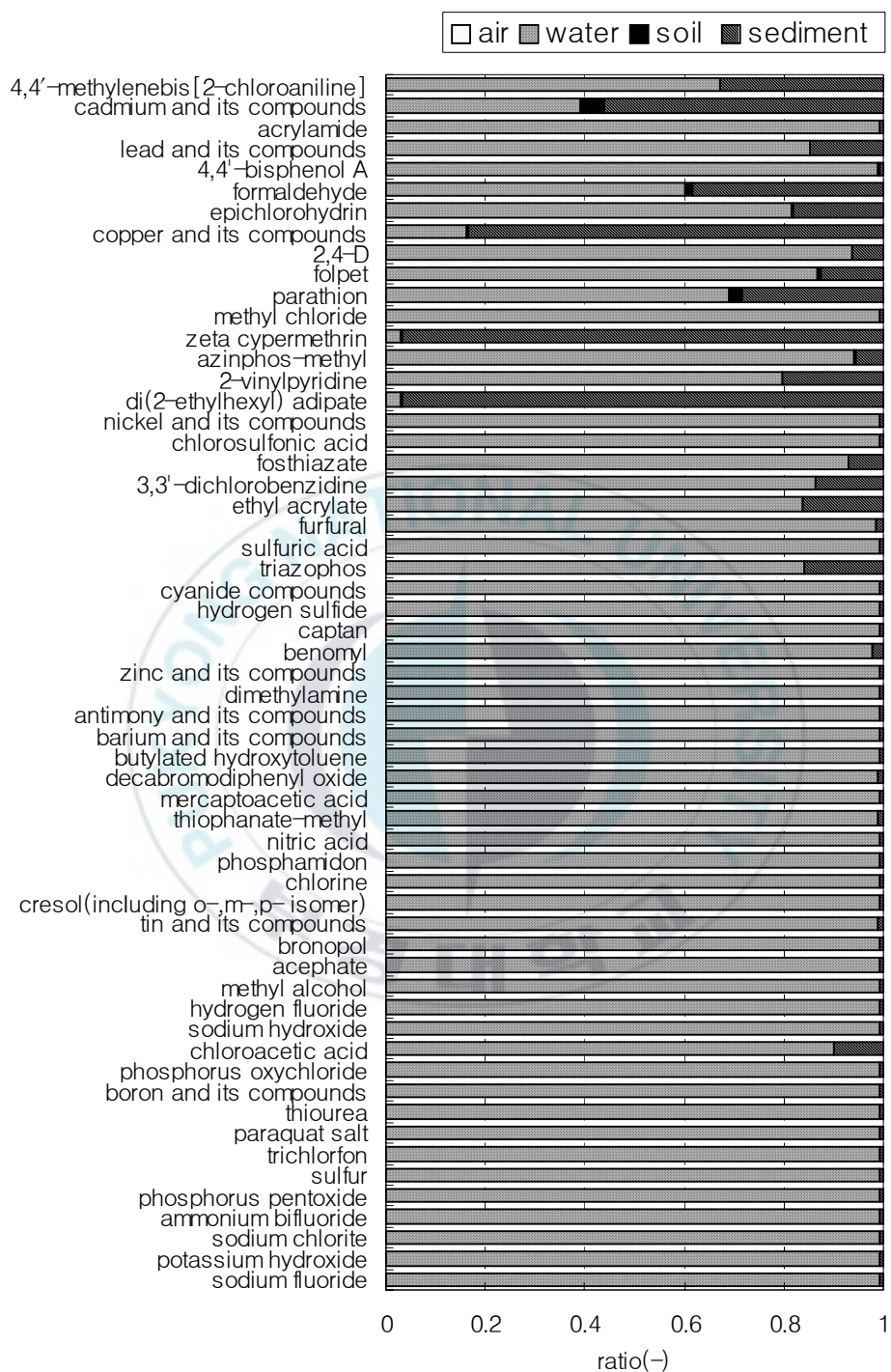


Fig. 29. Mass distribution ratios of chemicals in four environmental media (*continued*).

Table 24. Input data for estimation of chemical ranking using POT

Regional area	Busan	
Object (x_i)	174 chemical substances including toluene	
Descriptor (q_j)	Chemical conc. of 8th environmental compartments	
	q_{air} : Air	q_{water_1} : Freshwater
	q_{water_2} : Seawater	q_{soil_1} : Natural soil
	q_{soil_2} : Agricultural Soil	q_{soil_3} : Urban/Industrial soil
	q_{sed_1} : Freshwater sediment	q_{sed_2} : Seawater sediment

MUSEM 결과의 추정된 환경중 화학물질 농도에 따른 각 매체별 관리우선순위는 대기의 경우는 toluene, xylene, acetylene, ethylene, propylene 등의 순이었으며, 육수역 물환경의 경우는 lead, sodium hydroxide, cartap, azinphos-methyl, parawuat salt의 순으로, 도시·산업용지의 경우는 azinphos methyl, iprobenfos, carbofuran, molinate, nitric acid의 순으로, 육수역 저질의 경우는 decabromodiphenyl oxide, endosulfan, iprobenfos, chlorpyrifos, azinphos methyl의 순으로 나타났으며, 각 매체별 물질농도에 따른 우선순위가 다를 수 있었으며 이 모두를 고려한 총체적 관리우선대상 물질을 선정하고자 POT를 적용하였다. MUSEM 추정 농도에 따른 상위 20종의 물질은 Table 25에 나타나 있다.

부산지역에 대한 화학물질의 관리우선순위를 결정함에 있어, 화학물질 농도를 기반으로 POT와 결합한 결과는 Fig. 30과 같은 Hasse diagram을 구하였으며, Table 26에는 8가지 환경매체중의 농도 모두를 고려한 우선관리대상의 상위 15종을 나타내었다. 위해도평가를 위한 노출가능성을 평가할 때, POT의 순위결정법에 따르면, 부산의 경우에 있어서 관리의 우선순위가 높은 화학물질은 Toluene, Acetic acid, Hydrogen Chloride, Azinphos-methyl, Acetaldehyde 등의 순이었다. 이는 배출량이 많은 순서인 Table 21의 Toluene, Xylene, Sodium hydroxide, Ethylene, Acetylene의 순인 배출량에 따른 노출가능성과 상이하게 나타나 MUSEM과 POT를 이용한 우선순위 결정이 필요한 것으로 사료된다.

Table 25. The top 20 ranking from chemical concentration of each compartment in Busan, Korea

Rank	Air	Freshwater	Seawater	Natural soil
1	toluene	lead and its compounds	sodium hydroxide	azinphos-methyl
2	xylene	sodium hydroxide	lead and its compounds	nitric acid
3	acetylene	cartap	methyl alcohol	fenitrothion
4	ethylene	azinphos-methyl	ethyl acetate	iprobefos
5	propylene	paraquat salt	methyl ethyl ketone	di(2-ethylhexyl) phthalate
6	ethyl acetate	nitric acid	2-propanol	sodium hydroxide
7	methyl ethyl ketone	sulfuric acid	cartap	fenthion
8	formaldehyde	chromium and its compounds	2-ethoxyethyl acetate	chlorothalonil
9	methyl alcohol	iprobefos	endosulfan	lead and its compounds
10	methyl tert-butyl ether	potassium hydroxide	paraquat salt	zinc and its compounds
11	butane	endosulfan	sulfuric acid	manganese and its compounds
12	n-hexane	thiophanate-methyl	formaldehyde	edifenphos
13	styrene	barium and its compounds	azinphos-methyl	copper and its compounds
14	benzene	benomyl	chromium and its compounds	2-propanol
15	2-propanol	sulfur	acetaldehyde	chlorpyrifos
16	acetaldehyde	manganese and its compounds	hydrogen chloride	hydrogen fluoride
17	2-ethoxyethyl acetate	zinc and its compounds	toluene	2-ethoxyethyl acetate
18	ethylbenzene	phosphamidon	methyl tert-butyl ether	methyl alcohol
19	1,3-butadiene	hydrogen peroxide	xylene	chromium and its compounds
20	trichloroethylene	chlorothalonil	iprobefos	benomyl

Table 25. The top 20 ranking from chemical concentration of each compartment in Busan, Korea (*continued*)

Rank	Agricultural soil	Urban/Industrial soil	Freshwater sediment	Seawater sediment
1	butylbenzyl phthalate	azinphos-methyl	decabromodiphenyl oxide	decabromodiphenyl oxide
2	azinphos-methyl	iprobefos	endosulfan	endosulfan
3	di(2-ethylhexyl) phthalate	carbofuran	iprobefos	di(2-ethylhexyl) phthalate
4	decabromodiphenyl oxide	molinate	chlorpyrifos	chlorpyrifos
5	butylated hydroxytoluene	nitric acid	azinphos-methyl	zeta cypermethrin
6	endosulfan	fenitrothion	lead and its compounds	iprobefos
7	zeta cypermethrin	fenthion	zeta cypermethrin	butylbenzyl phthalate
8	chlorpyrifos	edifenphos	sodium hydroxide	sodium hydroxide
9	nitric acid	parathion	butylbenzyl phthalate	xylene
10	iprobefos	benomyl	di(2-ethylhexyl) phthalate	azinphos-methyl
11	toluene 2,4-diisocyanate	cartap	cartap	butylated hydroxytoluene
12	sodium hydroxide	di(2-ethylhexyl) phthalate	paraquat salt	lead and its compounds
13	chlorothalonil	sodium hydroxide	edifenphos	propargite
14	fenitrothion	chlorothalonil	nitric acid	toluene
15	lead and its compounds	lead and its compounds	sulfuric acid	methyl alcohol
16	edifenphos	zinc and its compounds	chlorothalonil	ethyl acetate
17	zinc and its compounds	copper and its compounds	chromium and its compounds	toluene 2,4-diisocyanate
18	xylene	manganese and its compounds	benomyl	decamethrin
19	copper and its compounds	phorate	butylated hydroxytoluene	cyfluthrin
20	fenthion	2,4-D	potassium hydroxide	chlorothalonil

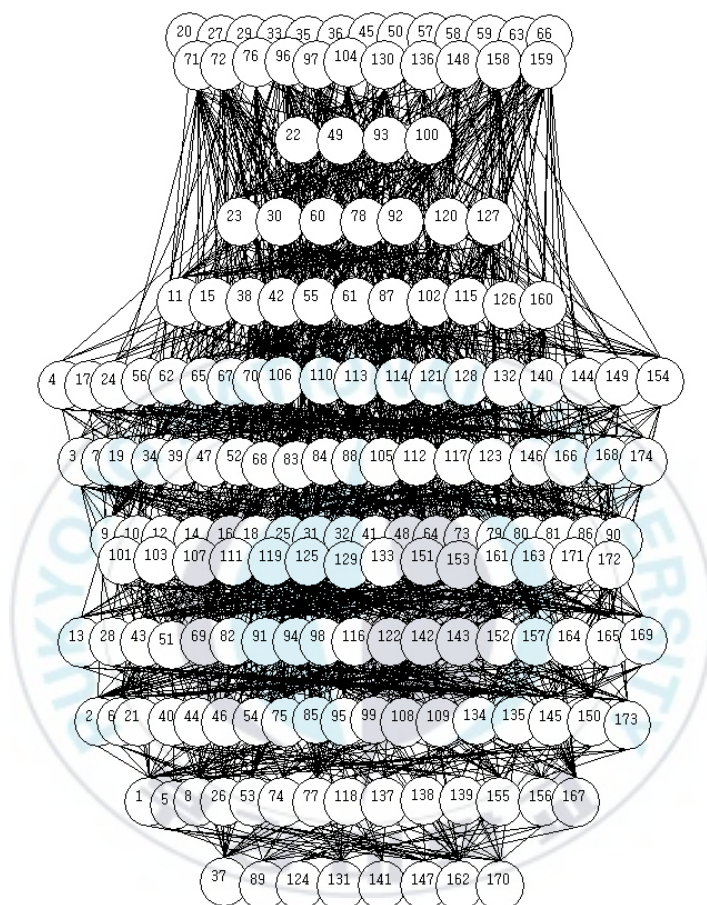


Fig. 30. Hasse diagram for a partial order with 174 chemical substances and 8th environmental compartments.

Table 26. The top 15 ranking from POT using the computed result of MUSEM in Busan, Korea

Rank	Chemicals name	No	Computed conc. of chemical substances from MUSEM							Estimated Releases for MUSEM	
			Air (ug/m ³)	Fresh water (ug/L)	Sea water (ug/L)	Natural soil (ug/kg)	Agri. soil (ug/kg)	Urban /Ind. soil (ug/kg)	Fresh Water Sediment (ug/kg)		Sea Water Sediment (ug/kg)
1	Toluene	20	1.02E+00	8.81E-03	3.38E-03	5.99E-02	1.06E-01	5.99E-02	3.46E-02	1.26E-02	toluene
2	Acetic acid	93	4.03E-03	8.24E-01	9.30E-04	2.50E-02	1.85E-02	2.50E-02	4.71E-01	5.43E-04	xylene
3	Hydrogen chloride	127	3.11E-02	1.68E-01	3.52E-03	3.37E-03	1.70E-02	3.37E-03	1.06E-01	2.28E-03	sodium hydroxide
4	Azinphos-methyl	91	1.21E-05	4.95E+01	3.82E-03	5.25E+02	2.20E+02	5.25E+02	2.33E+02	1.75E-02	ethylene
5	Acetaldehyde	120	4.93E-02	2.25E-02	3.52E-03	7.61E-03	5.39E-03	7.61E-03	1.32E-02	2.11E-03	acetylene
6	Butylbenzyl phthalate	158	8.12E-05	6.07E-01	3.37E-04	3.67E-02	3.32E+02	3.67E-02	7.01E+01	2.22E-02	propylene
7	Formaldehyde	78	1.42E-01	9.14E-03	4.04E-03	2.24E-03	1.89E-03	2.24E-03	5.63E-03	2.55E-03	ethyl acetate
8	Methyl tert-butyl ether	60	1.27E-01	7.60E-03	3.36E-03	4.02E-03	3.86E-03	4.02E-03	5.33E-03	2.41E-03	formaldehyde
9	Carbofuran	59	1.14E-02	3.20E-02	5.50E-04	6.19E-03	3.87E-03	2.93E+01	7.67E-02	1.32E-03	methyl ethyl ketone
10	Phenol	22	6.76E-04	4.31E-01	2.13E-04	4.18E-02	6.70E-02	4.18E-02	3.92E-01	1.97E-04	butane
11	Cresol	49	3.11E-03	3.46E-02	4.24E-04	1.39E-01	5.00E-02	1.39E-01	4.84E-02	5.97E-04	n-hexane
12	Toluene 2,4-diisocyanate	87	1.02E-03	8.49E-02	2.69E-04	1.83E-03	3.46E+00	1.83E-03	2.42E+00	6.71E-03	2-propanol
13	chlorpyrifos	72	2.67E-05	6.10E-01	1.68E-04	3.76E-01	1.33E+01	3.76E-01	2.47E+02	1.12E-01	methyl alcohol
14	1-chloro-2-nitrobenzene	160	2.59E-04	2.37E-01	1.54E-04	2.64E-03	5.83E-02	2.64E-03	5.09E-01	3.31E-04	styrene
15	edifenphos	61	8.92E-06	8.91E-01	1.54E-04	4.83E-01	5.46E01	7.96E+00	1.56E+01	2.43E-03	sulfuric acid

V. 결론

환경오염을 통해 인간의 건강이나 생태계에 좋지 않은 영향을 미칠 우려가 있는 화학물질의 효율적인 관리를 위하여, 국내 화학물질관리를 위한 위해성평가 시 필요한 관리우선순위 결정기법에 부분순서이론(Partial Order Theory; POT)을 도입하고, 본 연구에서 개발한 다매체환경모델 MUSEM (MUltimedia Simplebox-systems Environmental Model)을 이용한 노출가능성 평가결과와 결합하여 관리우선순위 결정시스템을 구축하였다.

본 연구에서 화학물질관리에 있어 위해성평가지 이용되는 보다 효율적인 모델링 수행을 위해서 화학물질의 물성 DB 및 지역 개황 DB 등 프로그램적으로 연결하여, 수십 또는 수백종의 화학물질을 동시에 시뮬레이션 가능한 MUSEM을 개발하였다.

MUSEM을 이용하여 62종의 화학물질에 대하여 일본 47개 지역의 환경매체 중 농도에측을 실시하고, 추정된 화학물질 농도는 실측치와 비교 분석하였으며, 민감도 분석을 실시하여 모델링결과의 타당성을 검토하였다. MUSEM의 예측결과, 동경지역에 있어서 각 매체별 잔류량 분포를 살펴보면, 한 매체에 50%이상 다량 분포하는 물질은 대기의 경우 1,3-butadiene (99.8%) 등 16종, 물환경의 경우 piperazine (99.8%) 등 41종에 달했다. 토양의 경우는 p-chloronitrobenzene(88.5%) 등의 3종이 50%이상 다량 분포하였고, 저질의 경우는 tri-n-butyl phosphate가 21.9%로 가장 높은 분포비를 나타내는 것으로 예측되었다. 이러한 62종의 물질에 대한 매체별 잔류비(%)는 수역에 대부분의 물질이 분포하는 것으로 예측되었다.

또한 21종 화학물질에 대하여 동경지역을 중심으로 분해가 일어나지 않는 경우(Case 1)와 일어나는 경우(Case 2)에 대하여 인간의 1일 화학물질 섭취량을 산정하였다. MUSEM에 의한 모델링 결과, 분해가 일어나지 않는 것으로 가정한 Case 1의 경우, ethylenedichloride, bromomethane, trans-1,2-dichloroethylene, 1,3-butadiene, chloromethane, vinylidenechloride, tribromomethane, carbon disulfide, 1,2-dichloropropane, isoprene, nitrobenzene의 11종은 Regional area와 Continental area의 1일 섭취량이 거의 같은 값이었다. 이들 11종은 대부분이 인간의 공기 호흡이 주요 섭취원인을 볼 때, Regional area와 Continental area간의 대기중 높은 이행성에 따른 것으로 여겨진다. 그 외의 높은 용해도(amitrole; 280

g/L) 등과 같은 다른 물성을 갖는 경우는 Regional area와 Continental area에서 인간의 1일 화학물질 섭취량이 수~수십배의 차이가 났다.

일본의 제2종감시화학물질이 난분해성임을 고려한 Case 2의 경우 1일 섭취량은 분해를 고려하지 않은 Case 1의 1일 섭취량과 비교하여 Regional area에서는 0.01%~50% (평균 10%), Continental area에서는 0.01%~16% (평균 3%)로 더 많이 감소하였다. 화학물질의 분해속도의 크기는 1일 섭취량의 추정에 이처럼 큰 영향을 미치는 것을 알 수 있으며, 더욱 상세한 노출평가를 실시할 경우에는 생물분해, 수중이나 대기중의 분해를 포함하여, 실제의 상황에 따라 그 값을 채택할 필요성이 있는 것으로 판단된다.

부산지역에 대하여 TRI 자료에서 이용가능한 174종의 화학물질을 대상으로 MUSEM을 적용하여 8가지 환경매체(대기, 육수역 물환경, 해수역 물환경, 자연지, 농지, 도시·산업용지, 육수역 저질, 해수역 저질)중 화학물질 농도를 산정하였다. 이를 기반으로 POT를 적용하여 관리가 우선시 되는 화학물질을 결정하였다. 위해도 평가를 위한 노출가능성을 평가할 때, POT의 순위결정법에 따르면, 부산의 경우에 있어서 관리의 우선순위가 높은 화학물질은 toluene, acetic acid, hydrogen chloride, azinphos-methyl, acetaldehyde 등이었다. 이는 배출량이 많은 순서인 toluene, xylene, sodium hydroxide, ethylene, acetylene와는 상이하게 나타나 MUSEM과 POT를 이용한 우선순위 결정이 필요한 것으로 사료된다.

참고문헌

- 건설교통부, 2002. 건설교통통계연보, pp. 670.
- 김미경, 배희경, 송상환, 구현주, 김현미, 최광수, 전성환, 이문순, 2005. EQC 모델을 이용한 벤조일 퍼록사이드의 다매체 환경거동 예측. 대한환경공학회지 27 (10), 1090-1098.
- 김윤관, 2005. 유해화학물질의 수서 생태위해성평가를 위한 유역기반 다매체동태 모델(ECORAME)의 개발과 활용. 서울대학교박사학위논문, pp. 152.
- 민달기, 이승희, 이시진, 1998. 유해성폐기물 관리의 우선 순위 선정기법에 관한 연구. 한국폐기물학회지 15 (3), 223-233.
- 박광식, 2003. EQC모델을 이용한 Benzoic acid의 환경분포 예측. 한국환경독성학회지 18 (1), 63-67.
- 부산광역시, 1998. 부산광역시 환경보전종합계획, pp. 709.
- 부산광역시, 2003. 부산통계연보, pp. 645.
- 연세대학교 환경공해연구소, 환경부, 2003. 위해우려물질 선정 및 평가 연구. pp. 662.
- 차순우, 주철균, 박현수, 박세진, 김필제, 이상목, 최경희, 이종협, 2003. 환경관리대상 오염물질 우선순위 선정방법 및 도시와 산단지역의 주요 오염물질 선정. 한국화학공학 41 (3), 357-367.
- 한국화학연구소, 1995. 환경오염물질의 위험성 확인 및 독성평가에 관한 연구(III). 환경부, pp. 273.
- 환경부, 2002. 환경통계연감. pp. 660.
- 환경부, 2004a. 2002년도 화학물질 배출량 조사결과. pp. 46.
- 환경부, 2004b. 2002년도 비점오염원(농약, 자동차 등)의 화학물질 배출량 조사결과. pp. 39.
- 환경부, 2005. 환경백서. pp. 720.
- Bartel, H. G., 1996. Mathematische Methoden in der Chemie. Spektrum Akademischer Verlag, Germany.
- Behrendt, H., Altschuh, J., Sixt, S., Gasteiger, J., Höllering, R., Kostka, T., 1999.

- A unified approach to exposure assessment by computer models for degradation reactions and soil accumulation: The triazine herbicide example. *Chemosphere* 38 (8), 1811-1823.
- Birkhoff, G., 1961. Lattice theory., American Mathematical Society, Colloquium publications pp. 283.
- Brandes, L. J., Den Hollander, H., Van de Meent, D., 1996. SimpleBox 2.0: a nested multimedia fate model for evaluating the environmental fate of chemicals. National Institute of Public Health and the Environment (RIVM), Bilthoven, The Netherlands, pp. 155.
- Brüggemann, R., Bartel, H. G., 1999. A theoretical concept to rank environmentally significant chemicals. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* 39 (2), 211-217.
- Brüggemann, R., Halfon, E., 1990. Ranking for environmental hazard of the chemicals spilled in the Sandoz accident in November 1986. *Science of the Total Environment* 97/98, 827-837.
- Brüggemann, R., Münzer, B., 1993. A graph-theoretical tool for priority setting of chemicals. *Chemosphere* 27 (9), 1729-1736.
- Brüggemann, R., Steinberg, C., 2000. Einsatz der Hassediagrammtechnik zur vergleichenden Bewertung von Analysendatenam Beispiel der Umweltuntersuchungen in den Regionen Baden-Württembergs. In: Günzler, H., Editio, 2000. *Analytiker Taschenbuch*, 21, Springer-Verlag, Berlin, 3-33.
- Brüggemann, R., Bücherl, C., Pudenz, S., Steinberg, C. E. W., 1999. Application of the concept of partial order on comparative evaluation of environmental chemicals. *Acta hydrochimica et hydrobiologica* 27 (3), 170-178.
- Brüggemann, R., Halfon, E., Welzl, G., Voigt, K., Steinberg, C. E. W., 2001. Applying the concept of partially ordered sets on the ranking of near-shore sediments by a battery of tests. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* 41 (4), 918-925.

- Brüggemann, R., Lerche, D., Sørensen, P.B., 2002. First attempts to relate structures of Hasse diagrams with mutual probabilities. In: Order Theory in Environmental Sciences, Integrative Approaches, The 5th Hasse Workshop, National Environmental Research Institute, Roskilde, Denmark, November 2002.
- Brüggemann, R., Sørensen, B. P., Lerche, D., Carlsen, L., 2004. Estimation of averaged ranks by a local partial order model. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* 44 (2), 618-625.
- Cahill, T. M., Cousins, I., Mackay, D., 2003. General fugacity based model to predict the environmental fate of multiple chemical species. *Environmental Toxicology and Chemistry* 22 (3), 483-493.
- California EPA, 1993. CalTOX, a multimedia total-exposure model for hazardous-waste sites. The Office of Scientific Affairs, Department of Toxic Substance Control, Sacramento, CA, USA.
- Carlsen, L., 2006. A combined QSAR and partial order ranking approach to risk assessment. *SAR and QSAR in Environmental Research* 17 (2), 133-146.
- Davey, A. B., Priestley, H. A., 1990. Introduction to lattices and order. Cambridge University Press, Cambridge. pp. 310.
- Davis, G. A., Swanson, M., Jones, S., 1994. Comparative evaluation of chemical ranking and scoring methodologies. EPA, pp. 61.
- Environment Agency of Japan, 1993. Comparisons of global environmental fate models applicability of global models to Japanese environment. Prepared to OECD Phase 1 SIDS Initial Assessment Meeting.
- Escher, B. I., Hermens, J. L. M., 2002. Modes of action in ecotoxicology: their role in body burdens, species sensitivity, QSARs, and mixture effects. *Environmental Science and Technology* 36 (20), 4201-4217.
- Galassi, S., Provini, A., Halfon, E., 1996. Risk assessment for pesticides and their metabolites in water. *International Journal of Environmental Analytical Chemistry* 65, 331-344.

- Graham, R. L., 1982. Linear extensions of partial orders and the FKG inequality. In: Rival, I., Editor, 1982. Ordered Sets, pp. 213-236.
- Halfon, E., Reggiani, M. G., 1986. On Ranking chemicals for environmental hazard. *Environmental Science and Technology* 20 (11), 1173-1179.
- Halfon, E., Galassi, S., Brüggemann, R., Provini, A., 1996. Selection of priority properties to assess environmental hazards of pesticides. *Chemosphere* 33 (8), 1543-1562.
- Hansen, B. G., Van Haelst, A. G., Van Leeuwen, K., Van Der Zandt, P., 1999. Priority setting for existing chemicals: European union risk ranking method. *Environmental Toxicology and Chemistry* 18 (4), 772-779
- Hasse, H., 1952. Über die Klassenzahl abelscher Zahlkörper., Akademie-Verlag, Berlin, Germany.
- Junge, C. E., 1977. Fate of pollutants in the air and water environments. Suffet, I. H. (ed), Wiley interscience, New York, 7-25.
- Klein, J., Brüggemann, R., Voigt, K., Steinberg, C. E. W., 1995. Advances in comparative analysis of adverse effects in aquatic ecosystems with emphasis on studies with humic substances and on progress in mathematical analysis techniques. *Water Research* 29 (10), 2261-2268.
- Konemann, H., Visser, R., 1988. Selection of chemicals with high hazard potential: Part 1: WMS-scoring system. *Chemosphere* 17 (10), 1905-1919.
- Lerche, D., Sørensen, P.B., 2003. Evaluation of the ranking probabilities for partial orders based on random linear extensions. *Chemosphere* 53 (8), 981-992.
- Lerche, D., Sørensen, P. B., Brüggemann, R., 2003. Improved estimation of the ranking probabilities in partial orders using random linear extensions by approximation of the mutual ranking probability. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* 43 (5), 1471-1480.
- Lerche, D., Brüggemann, R., Sørensen, P., Carlsen, L., Nielsen, O. J., 2002a. A comparison of partial order technique with three methods of multi-criteria analysis for ranking of chemical substances. *Journal of Chemical*

- Information and Modeling 42 (5), 1086-1098.
- Lerche, D., Matsuzaki, S. Y., Sørensen, P. B., Carlsen, L., Nielsen, O. J., 2004. Ranking of chemical substances based on the Japanese Pollutant Release and Transfer Register using partial order theory and random linear extensions. *Chemosphere* 55 (7), 1005-1025.
- Lerche, D., Sørensen, P. B., Larsen, H. S., Carlsen, L., Nielsen, O. J., 2002b. Comparison of the combined monitoring-based and modelling-based priority setting scheme with partial order theory and random linear extensions for ranking of chemical substances. *Chemosphere* 49 (6), 637-649
- Linders, J. B. H. J., Jager, D. T., 1998. Uniform System for the Evaluation of Substances (USES), version 2.0. National Institute of Public Health and the Environment (RIVM), Bilthoven, The Netherlands, pp. 216.
- Linders, J. B. H. J., Rikken, M. G. J., Bakker, J. Van der Poel, P., 2002. Uniform System for the Evaluation of Substances (USES), version 4.0. National Institute of Public Health and the Environment (RIVM), Bilthoven, The Netherlands, pp. 616.
- Mackay, D., 1979. Finding fugacity feasible. *Environmental Science and Technology* 13 (10), 1218-1223.
- Mackay, D., Di Guardo, A., Paterson, S., Cowan, C. E., 1996. Evaluating the environmental fate of a variety of types of chemicals using the EQC model. *Environmental Toxicology and Chemistry* 15 (9), 1627-1637.
- Mackay, D., Hubbarde, J., Webster, E., 2003. The role of QSARs and fate models in chemical hazard and risk assessment: Paper prepared for Quantitative Structure-Activity Relationships (QSAR) Proceedings of the QSAR 2002 Conference, Ottawa. *QSAR and Combinatorial Science* 22 (1), 106-112
- Mary, B. S., Adam, C. S., 1997. Chemical ranking and scoring: Guidelines for relative assessment of chemicals. SETAC press. pp. 154.
- Ministry of economy, trade and industry of Japan, Ministry of health, labour

- and welfare of Japan, Ministry of the environment of Japan, 2003. Outline of the 2003 partial amendment to the chemical substances control law. pp. 5.
- Polder, M. D., Hulzebos, E. M., Jager D. T., 1998. Bioconcentration of gaseous organic chemicals in plant leaves: comparison of experimental data with model predictions. *Environmental Toxicology and Chemistry* 17 (5), 962-968.
- Roh, K. J., Kim, D. M., Cho, H. S., Shiraishi, H., Lee, S. M., Park, C. K., 2004a. 10, Ranking of chemical substances for risk assessment using a multi-media environmental model and partial order theory. 4th Conference of the International Society for Ecological Informatics (ISEI4).
- Roh, K. J., Hikihara, Y., Kim, D. M., Shiraishi, H., 2004b. 12. Fate of chemical substances using a multi-media environmental model. The 7th Annual Meeting of Japan Society of Endocrine Disrupters Research.
- Roh, K. J., Kim, D. M., Cho, H. S., Shiraishi, H., Lee, S. M., Park, C. K. 2004a. 10, Ranking of chemical substances for risk assessment using a multi-media environmental model and partial order theory. 4th Conference of the International Society for Ecological Informatics (ISEI4).
- Shiraishi, H., Roh, K. J., 2004. Research on modeling for the fate of endocrine disruptors, 4th Japan-Korea Cooperative Joint Symposium on Endocrine Disrupting Chemicals.
- Snyder, E. M., Snyder, S. A., Giesy, J. P., Blonde, S. A., Hurlburt, G. K., Summer, C. L., Mitchell, R. R., Bush, D. M., 2000, SCRAM: A scoring and ranking system for persistent, bioaccumulative, and toxic substances for the north american great lakes. *Environmental Science and Pollution Research* 7, 51-61.
- Sørensen, P. B., Brüggemann, R., Carlsen, L., Mogensen, B. B., Kreuger, J., Pudenz, S., 2003. Analysis of monitoring data of pesticide residues in surface waters using partial order ranking theory. *Environmental Toxicology and Chemistry* 22 (3), 661-670.

- Sørensen, P.B., Mogensen, B.B., Gyldenkerne, S., Rasmussen, A. G., 1998. Pesticide leaching assessment of method for ranking both single substances and scenarios of multiple substance use. *Chemosphere* 36 (10), 2251-2276.
- Struijs, J., 1996. SimpleTreat3.0: a model to predict the distribution and elimination of chemicals by sewage treatment plants. RIVM report no. 719101025, National Institute of Public Health and the Environmental (RIVM), Bilthoven, The Netherlands, pp. 49
- Struijs, J., Stoltenkamp J., Van De Meent, D., 1991. A spreadsheet-based box model to predict the fate of xenobiotics in a municipal wastewater treatment plant. *Water Research* 25 (7), 891-900.
- Swanson, M. B., Davis, G. A., Kincaid, L. E., Schultz, T. W., Bartmess, J. E., Jones, S. L., George E. L., 1997. A screening method for ranking and scoring chemicals by potential human health and environmental impacts. *Environmental Toxicology and Chemistry* 16 (2), 372-383.
- Travis, C. C., Arms, A. D., 1988. Bioconcentration of organics in beef, milk, and vegetation. *Environmental Science and Technology* 22 (3), 271-274.
- US EPA, 1994. Chemical hazard evaluation for management strategies; A method for ranking and scoring chemicals by potential human health and environmental impacts.
- US EPA, 1998. Chemical ranking report for the RCRA PBT List Docket (Contract Number 86-W98-085).
- Van de Meent, D., 1993. SimpleBox: A generic multimedia fate evaluation model. National Institute of Public Health and the Environmental (RIVM), Bilthoven, The Netherlands, pp. 107.
- Van Leeuwen, C. J., Bro-Rasmussen, F., Feijtel, T. C. J., Amdt, R., Bussian, B. M., Calamari, D., Glynn, P., Grandy, N. J., Hansen, B., Van Hemmen, J. J., Hurst, P., King, N., Koch, R., Müller, M., Solbé, J. F., Speijers, G. A. B., Vermeire, T., 1996. Risk assessment and management of new and existing chemicals. *Environmental Toxicology and Pharmacology* 2 (4),

- 243-299.
- Voigt, K., Brüggemann, R., Pudenz, S., 2006. A multi-criteria evaluation of environmental databases using the Hasse Diagram Technique (ProRank) software. *Environmental Modelling and Software* 21 (11), 1587-1597.
- Voigt, K., Welzl, G., Brüggemann, R., 2004. Data analysis of environmental air pollutant monitoring systems in Europe. *Environmetrics* 15 (6), 577-596.
- Weiss, M., Kordel, W., Kuhnen-Clausen, D., Lange, A. W., Klein, W., 1988. Priority setting of existing chemicals. *Chemosphere* 17 (8), 1419-1443.
- Winkler, P. M., 1982. Average height in a partially ordered set. *Discrete Mathematics* 39, 337-341.
- Winkler, P. M., 1983. Correlation among partial orders. *SIAM Journal on Algebraic and Discrete Methods* 4 (1), 1-7.
- 日本水道産業新聞社, 2002.9. 下水道年鑑2003年版, pp. 1840.
- 日本統計協會, 總務省統計局, 2001. 統計でみる日本2002. pp. 341.
- 日本環境省, 2003. P R T R 特定化學物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律第8條第4項及び第9條第2項に基づく公表ーファイル記録データ (全データ) <排出年度:平成13年度>.
- 日本環境省・經濟産業省, 2003. P R T R 特定化學物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律第8條第4項及び第9條第2項に基づく公表ー届出排出量・移動量及び届出外排出量の集計結果<排出年度:平成13年度>.
- 日本厚生省, 2002. 平成13年 國民營養調查結果の概要について.
- 日本總務省統計局, 統計研修所, 2002. 日本統計年鑑(第52回(2003)). 日本統計協會, pp. 920.

감사의 글

흑색 클로즈 양장에 박힌 금박글씨가 가득한 책장의 박사학위논문들을 바라다보며, 17년의 긴 세월이 이 논문을 완성하고자 함에 있었음을 새삼 깨닫게 됩니다. 외로움과 주저함의 갈등 속에서도 끝까지 이 길 끝에 도달할 수 있었음은 스스로의 부족함에 좌절하지 않는 지혜와 용기 통찰력으로 힘든 고비를 넘길 수 있도록 도와주신 참으로 많은 분들의 사랑과 격려가 있었기 때문으로 여기며 이 자리를 빌려 감사의 뜻을 전하고자 합니다.

언제나 그 모습 그대로 인자한 가르침과 격려를 베풀어 주신 박청길교수님의 은혜에 고개 숙여 깊은 감사를 드립니다. 논문의 심사과정에서 면밀한 검토와 조언을 아끼지 않으신 이석모교수님, 이제근교수님, 이병현교수님, 조현서교수님께 감사드립니다. 그리고 늘 관심을 가지고 도움을 주신 강임석교수님, 여석준교수님, 양병수교수님께도 감사의 말씀 전합니다.

環境リスクという興味深いテーマを紹介し、研究方針など多くの御指導してくださった独立行政法人国立環境研究所白石寛明先生に深く感謝を表します。本研究を進めるにあたって、貴重な助言を頂いた環境リスク研究センターい堀口敏宏氏、西川希氏、曝露評価研究室引原良枝氏、今泉圭隆氏に感謝します。何一つ慣れない日本での生活の初めからお世話になった反保加帆里氏、相川加奈子氏また、名前の拳がっていない方々をも含めた皆様方に心より感謝いたします。

본 연구가 진행되는 동안 많은 관심을 보여주신 유선재교수님, 최우정박사님, 이원찬박사님께 감사드립니다. 학문의 길에서 벗어나지 않도록 언제나 격려해 주신 송교욱박사님의 아낌없는 사랑에 부산발전연구원의 시절을 떠올리며, 참된 학문의 즐거움을 몸소 가르쳐주신 양진우박사님과 신성교박사님, 백경훈박사님께 감사드립니다. 언제 어디서나 항상 격려와 용기를 주신 최영찬교수님, 김광수교수님, 최희구박사님, 김도희교수님, 김종구교수님, 안옥성선배님, 권정노박사님, 김정숙박사님, 조은일교수님께도 감사의 마음을 드립니다. 논문의 마무리 진행이 잘 이루어질 수 있도록, 갑작스런 불청객과도 같은 저에게 많은 도움주신 이성호박사님과 새롭게 시작한 연구실생활이 짧은 기간이었지만 즐거울 수 있도록 많이 도와준 장세주, 윤민수, 전병률, 박지혜, 이주현 후배님께도 진심으로 고마움을 전함

니다. 입학시절부터 늘 같이 해 오며 힘든 시기도 같이 나눌 수 있었던 홍석진박사님, 박해식박사님, 박성준 동기님과 한명희, 김미화, 전은수를 비롯한 수질연구실의 모든 후배님들께도 진심으로 고마움을 전합니다.

저와 더불어 어둠과도 같았던 긴 터널을 지나오며 서로의 마음을 나눌 수 있었던 엄기혁박사님, 서인숙박사님, 김형철박사님, 송미경박사님께 감사드리며, 어려움을 같이 나눈 이정만님께도 조금만 더 힘내길 바라며 감사의 말씀 전합니다.

항상 지켜 봐주며 다독겨려준 친구 김영란, 김영미, 조정욱과 6년만에 다시 찾은 여미영, 그리운 전선경에게도 감사의 마음을 전합니다.

끝임 없는 학문에 대한 열정으로 격려를 아끼지 않으시고, 부족하기만한 딸의 앞날에 환한 등불이 되어 길을 밝혀주신 어머니와 따뜻한 맘으로 누나의 어려움을 배려해준 사랑하는 동생 근역과 이 기쁨을 같이 하고자 합니다. 딸을 바라보는 마음으로 불안과 염려 속에 지내신 시어머니와 시아버님께 그리고 각지에서 응원해준 시가 형제 김동환님, 이혜란님과 귀엽고 사랑스런 조카 나예, 김남희님, 이용훈님께 이 영광을 드립니다.

학업을 무사히 마칠 수 있도록 애정과 인내로 기쁨과 어려움을 함께 한 절대적 지원자인 남편 김동명교수와 너무나 이른 홀로서기에 힘들어 하며 늦은 밤 뜯눈으로 엄마를 기다려 준 갓 태어난 사랑스런 아들 도혁에게 글로는 다할 수 없는 사랑을 전합니다.

마지막으로 늘 자상함과 부드러움으로 저희를 대하셨고, 병환중에도 어린 저와 동생의 장래를 걱정하시던 아버지의 생전 모습을 더 더욱 그리워하며, 아버지 영전에 이 작은 결실을 바칩니다.