

附件 2

化学物质环境与健康暴露评估技术导则（试行）

中华人民共和国生态环境部

二〇二〇年十二月

目 录

1 适用范围.....	1
2 规范性引用文件.....	1
3 术语和定义.....	1
4 评估原则.....	3
5 评估程序.....	4
6 方案制定.....	5
7 信息收集.....	8
8 暴露场景构建.....	9
9 环境排放估算.....	14
10 环境暴露评估.....	19
11 健康暴露评估.....	27
12 暴露评估报告.....	29
附录 A 化学物质环境排放系数.....	31
附录 B 暴露参数推荐值.....	55
附录 C 环境行为与归趋参数计算.....	57
附录 D 化学物质在 C-STP (0) 中的归趋和暴露估算.....	62
附录 E 局部尺度环境暴露估算模型.....	68
附录 F 局部尺度人体健康暴露估算模型.....	75
附录 G 暴露估算工具 (CET)	77

化学物质环境与健康暴露评估技术导则

(试行)

为指导化学物质环境与健康暴露评估，制定本技术导则。

1 适用范围

本技术导则规定了化学物质环境与健康暴露评估原则、程序及方法。

本技术导则适用于化学物质的环境与健康暴露评估。

2 规范性引用文件

本技术导则引用了下列文件或其中的条款。凡是不注日期的引用文件，其有效版本适用于本技术导则。

HJ 2035 固体废物处理处置工程技术导则

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

《新化学物质环境管理登记办法》（生态环境部令 第12号）

《新化学物质环境管理登记指南》（生态环境部公告2020年第51号）

3 术语和定义

3.1 生命周期

化学物质从产生到最终废弃的各个阶段，包括生产、加工使用、消费使用和固体废物利用处置阶段等。

3.2 暴露场景

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

3.3 暴露途径

环境暴露途径指化学物质排放后到达环境受体的路线，健康暴露途径指化学物质经人体接触后进入人体的方式（如摄食、吸入、经皮）。

3.4 环境暴露

化学物质对环境中非人类受体的暴露。

3.5 健康暴露

化学物质进入环境后，一般人群经由环境的间接暴露。

3.6 排放源

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

3.7 排放场景

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

3.8 暴露评估

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

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

3.9 暴露模型

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

3.10 暴露参数

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

4 评估原则

4.1 科学性原则

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

4.2 先进性原则

根据我国化学物质环境管理的要求，结合国内外最新研究成果，鼓励运用更加科学、先进的技术方法开展环境与健康暴露评估。

4.3 审慎性原则

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

4.4 实用性原则

充分利用现有数据和资料，基于合理假设的标准暴露场景开展暴露评估。也可采用更接近实际情况的暴露场景开展评估。

5 评估程序

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

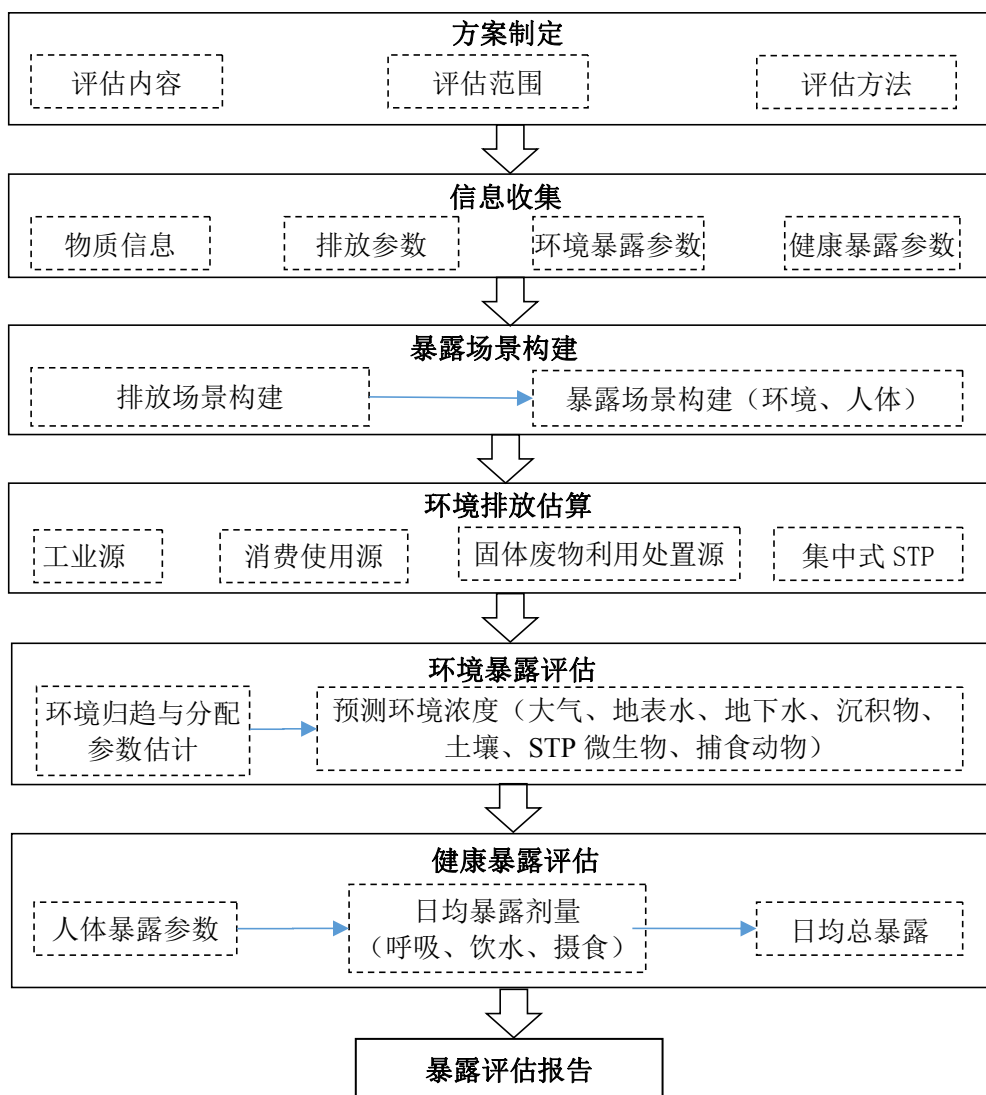


图 1 暴露评估程序

6 方案制定

开展环境与健康暴露评估前，应首先制定暴露评估方案，主要包括以下内容。

6.1 评估内容

暴露评估包括环境暴露评估和健康暴露评估，环境暴露评估主要估算化学物质在STP微生物环境、大气、地表水、沉积物、土壤、捕食动物中的预测环境浓度（PEC），健康暴露评估主要

估算化学物质经由环境对一般人群的日均暴露剂量（ADD），包括吸入、摄食和饮水途径。化学物质暴露评估需要估算的PEC和ADD见表1。

表 1 暴露评估内容

评估对象		相关环境介质或暴露途径	PEC/ADD
集中式 STP	微生物	STP 微生物环境	PEC_{stp}
大气环境	大气	大气	$PEC_{air,ann.L}$
水生环境	淡水水生生物	地表水	$PEC_{water.L}$
	淡水底栖生物	沉积物	$PEC_{sed.L}$
	水生动物捕食者	鱼	$PEC_{aqu.predator}$
土壤环境	土壤生物	土壤	$PEC_{soil.30.L}$
	陆生动物捕食者	蚯蚓	$PEC_{ter.predator}$
一般人群		大气（吸入途径）	ADD_{inh}
		土壤（摄食途径）	$ADD_{oral.soil}$
		鱼（摄食途径）	$ADD_{oral.food}$
		地表水或地下水（饮水途径）	$ADD_{oral.water}$

6.2 评估范围

6.2.1 空间尺度

环境与健康暴露评估的空间尺度分为局部尺度和区域尺度。

（1）局部尺度

基于“合理的最坏情形假设”，假定排放源附近（一般设定为距离中心点100 m到1000 m范围）存在敏感目标（评估对象），在评估的空间范围内只有单个排放源。

（2）区域尺度

相对于局部尺度而言，指更大范围的空间区域，可能涉及包括生产、加工使用、消费使用、固体废物利用处置等在内的多个

生命周期阶段的多个排放源。

6.2.2 生命周期阶段

化学物质暴露评估涉及的生命周期阶段一般包括生产、加工使用、消费使用和固体废物利用处置，应根据具体情况（其中，对新化学物质来说应包括其申请用途在中国境内的所有生命周期阶段）确定纳入评估范围的生命周期阶段。

6.2.3 评估对象

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

6.3 评估方法

可使用基于暴露场景的模型预测法和/或实测法，以多重证据的方式开展暴露评估。其中，新化学物质主要以模型预测方法开展评估。实测数据应经过质量评估和代表性评估。

6.3.1 模型预测法

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

6.3.2 实测法

实际监测拟评估化学物质在评估区域各环境介质、环境生物及食物中的浓度。

7 信息收集

7.1 化学物质信息

化学物质涉及的行业领域、生命周期阶段、用途。

化学物质属性信息，如：相对分子量、蒸气压、熔点、水溶解度、正辛醇-水分配系数、吸附系数，及生物降解性和生物富集系数等。

7.2 排放参数

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

7.3 环境暴露参数

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

7.4 健康暴露参数

暴露人群、暴露途径、人体暴露参数等。

7.5 暴露监测数据

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

8 暴露场景构建

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

8.1 排放场景构建

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

8.1.1 排放源识别

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

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

消费使用源指化学物质及相关产品的广泛分散使用导致的具有分散排放特征的排放源，如个人、家庭、分散型小规模加工使用者等。现有化学物质及相关产品应包含所有相关的在用用途，新化学物质应包含所有申请用途。

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

8.1.2 工业源排放场景构建

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

8.1.2.1 生产使用量

明确涉及的化学物质年生产量和/或使用量，包括本排放场景下局部尺度主要企业的生产使用量和区域尺度内所有的生产使用量。

8.1.2.2 生产使用工艺和三废产生情况

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

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

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

8.1.2.3 污染控制措施

如果有废水、废气和固体废物污染控制措施，应详细说明并给出其对拟评估化学物质的减排效率。应注意某些污染控制措施

在减少向一个环境介质排放的同时可能会增加向其他介质的排放（例如，对废气进行水淋净化处理，化学物质将由废气进入废水）。

8.1.2.4 排放时间

排放时间指年排放天数。

8.1.2.5 排放去向

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

对进入集中式STP处理的，明确集中式STP的规模和工艺、对拟评估化学物质的减排效率，以及集中式STP的废气、废水、污泥的排放去向、产生量及其中拟评估化学物质的含量和周边环境等信息。

8.1.2.6 排放频率

指连续排放和间歇排放。间歇排放指每月少于1次且每次不超过24小时的排放；不符合间歇排放特征的可默认为连续排放。

8.1.2.7 周边环境

包括影响化学物质环境归趋和分布的周边环境因素，如气象（如温度、风速、降雨）、受纳水体水文水质（如流量、悬浮物浓度）等。

8.1.3 消费使用源排放场景构建

消费使用源排放场景应明确化学物质消费使用情况，排放时

间和频率、排放去向、排放时空变异性，集中式STP处理情况等。

8.1.3.1 消费使用情况

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

8.1.3.2 排放时间和频率

默认为连续排放模式，排放时间为365天。

8.1.3.3 排放去向

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

8.1.3.4 排放的时空变异性

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

8.1.3.5 集中式 STP 处理情况

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

8.1.4 固体废物利用处置源排放场景构建

固体废物利用处置源排放场景应明确拟评估化学物质或含拟评估化学物质的相关固体废物类型（包括工业固体废物、含拟

评估化学物质的废弃产品等)、产生量、利用处置工艺和三废产生情况、污染控制措施、排放时间、排放途径和介质、排放频率模式、周边环境等内容,具体参照工业源排放场景(8.1.2)进行构建。

8.2 暴露场景构建

8.2.1 环境暴露场景

在排放场景的基础上,环境暴露场景须进一步明确以下信息:

(1) 环境暴露途径

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

(2) 环境暴露参数

指集中式STP、地表水、悬浮物、沉积物和土壤等环境介质的环境暴露参数,包括气象、受纳水体水文水质、沉积物与土壤理化特性等。

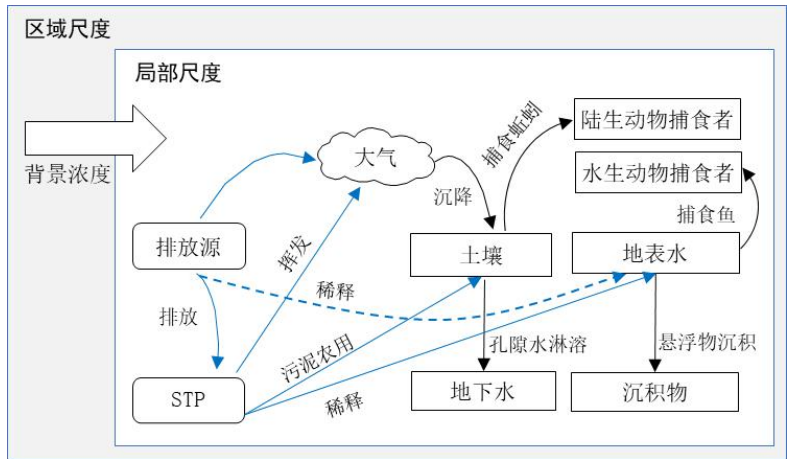


图2 环境暴露途径

8.2.2 健康暴露场景

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

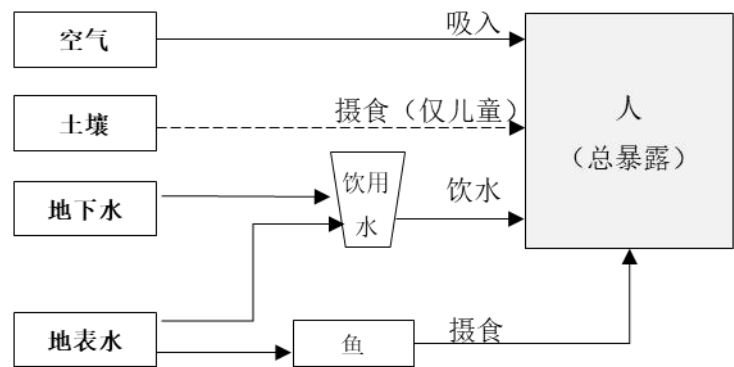


图3 人体暴露途径

9 环境排放估算

根据构建的排放场景，按照工业源（生产、加工使用）、消费使用源和固体废物利用处置源分别估算环境排放率。仅考虑正

常生产或使用条件下产生的环境排放，不包括泄漏、爆炸等事故性排放。

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

9.1 工业源排放估算

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

每个场景向环境介质（水、大气、土壤）的环境排放率计算方法见公式（1）：

$$E_{\text{env.L}} = \frac{Q_{\text{chemical}} \cdot F_{\text{main}} \cdot F_{\text{emission}} \cdot (1 - F_{\text{abatement}})}{T_{\text{emission}}} \quad (1)$$

其中 $\text{env} \in \{\text{water,air,soil}\}$

式中： E ——局部尺度向环境介质（水、大气、土壤）的日排放率， $\text{kg} \cdot \text{d}^{-1}$ ；

Q_{chemical} ——某排放场景涉及的化学物质的全国年生产量或使用量， $\text{kg} \cdot \text{y}^{-1}$ ；

F_{main} ——主要排放源的占比，无量纲。通常，默认 $F_{\text{main}}=1$ ；如果有多个排放源的，应按照最大的排放源估算；

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

$F_{\text{abatement}}$ ——企业自有污染控制措施对拟评估化学物质的减排效率，无量纲；对于废水经过集中式 STP 的，还应考虑集中式 STP 减排效率（具体计算过程见 9.4）。没有数据时，默认为 0；

T_{emission} ——年排放时间， $\text{d}\cdot\text{y}^{-1}$ 。应以每年最小排放天数计算，可参考表 2。

表 2 工业源不同生命周期阶段排放时间默认值

生命周期阶段	年生产/使用量 (Q_{chemical}) / $\text{t}\cdot\text{y}^{-1}$	年排放时间 (T_{emission}) / $\text{d}\cdot\text{y}^{-1}$
生产	<1 000	20
	1 000 - 10 000	100
	$\geq 10\ 000$	300
配制	< 100	10
	100 - 2 000	100
	$\geq 2\ 000$	300
使用	< 1 000	20
	1 000 - 5 000	100
	$\geq 5\ 000$	300

9.2 消费使用源排放估算

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

化学物质随生活污水排放时，一部分直接排入地表水，一部分经集中式 STP 处理后排入地表水。标准场景下，假设 50% 的废

水通过集中式STP处理，另50%直排进入地表水。也可根据排放源所在地的污水处理水平合理设置污水处理率，但须详细说明依据。

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

$$E_{\text{water.L}} = \frac{Q_{\text{chemical}} \cdot F_{\text{reg}} \cdot F_{\text{local}} \cdot F_{\text{variability}} \cdot F_{\text{emission}} \cdot (1 - F_{\text{directwater}})}{T_{\text{emission}}} \quad (2)$$

$$E_{\text{directwater.L}} = \frac{Q_{\text{chemical}} \cdot F_{\text{reg}} \cdot F_{\text{local}} \cdot F_{\text{variability}} \cdot F_{\text{emission}} \cdot F_{\text{directwater}}}{T_{\text{emission}}} \quad (3)$$

式中： E ——局部尺度排入集中式 STP 处理部分的废水年均日排放率（ $E_{\text{water.L}}$ ），或废水直接排放部分的地表水年均日排放率（ $E_{\text{directwater.L}}$ ）， $\text{kg} \cdot \text{d}^{-1}$ ；

Q_{chemical} ——某排放场景涉及的化学物质的全国年使用量， $\text{kg} \cdot \text{y}^{-1}$ ；

F_{reg} ——区域使用量占全国的比重，无量纲。默认为 0.1；

F_{local} ——集中式 STP 服务区域用量占区域用量的比例，无量纲。默认为 0.0005；

$F_{\text{variability}}$ ——空间和时间的变异因子，无量纲。默认为 4；

F_{emission} ——排放系数（以纯物质计），无量纲。可参考附录 A；

$F_{\text{directwater}}$ ——废水直排地表水比例，无量纲。默认为 0.5；

T_{emission} ——年排放时间， $\text{d} \cdot \text{y}^{-1}$ 。默认为 365。

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

9.3 固体废物利用处置源排放估算

对于环境排放具有显著贡献的固体废物利用处置方法，应进行定量的排放估算。可通过公式（4）估算大气、土壤和地表水

环境排放率，也可采用实际监测数据。

$$E_{\text{env.L}} = \frac{Q_{\text{chemical}} \times f_{\text{waste}} \times F_{\text{main}} \times F_{\text{emission}} \times (1 - F_{\text{abatement}})}{T_{\text{emission}}} \quad (4)$$

其中 $\text{env} \in \{\text{air, soil, water}\}$

式中： E ——局部尺度固体废物利用处置源向大气、土壤或地表水的日排放率， $\text{kg} \cdot \text{d}^{-1}$ ；

Q_{chemical} ——某排放场景涉及的化学物质的全国年生产量或使用量， $\text{kg} \cdot \text{y}^{-1}$ ；

f_{waste} ——某排放场景下，进入固体废物的化学物质的比例，无量纲；

F_{main} ——主要排放源的占比，无量纲。根据排放源分散性确定；

F_{emission} ——固体废物利用处置环境排放系数，无量纲。可参考附录 A；

$F_{\text{abatement}}$ ——废物利用处置源自有污染控制措施对拟评估化学物质的减排效率，无量纲；对于废水经集中式 STP 处理的，还应考虑集中式 STP 废水减排效率（具体计算过程见 9.4）。没有数据时，默认为 0；

T_{emission} ——年排放时间， $\text{d} \cdot \text{y}^{-1}$ 。

9.4 污水处理厂排放估算

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

表 3 集中式 STP 环境排放系数

参数名称	参数符号	单位	参数用途
集中式 STP 地表水排放系数	$F_{\text{stp.water}}$	无量纲	地表水环境暴露评估
集中式 STP 大气排放系数	$F_{\text{stp.air}}$	无量纲	大气环境暴露评估
集中式 STP 污泥排放系数	$F_{\text{stp.sludge}}$	无量纲	土壤环境暴露评估
污泥中化学物质浓度	C_{sludge}	$\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$	土壤环境暴露评估

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

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

10 环境暴露评估

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

10.1 环境归趋与分配参数推导

化学物质进入环境（包括集中式STP）后，经迁移、分配和降解等过程最终赋存于环境中。在预测PEC时，需要估算化学物

质的环境归趋与分配参数（见表4）。

表 4 需要估算的化学物质环境归趋与分配参数

归趋与分配过程	参数名称	参数符号	单位
气-水分配	气-水分配系数	$K_{\text{air-water}}$	无量纲
气-气溶胶分配	气溶胶颗粒的吸附比例	F_{aSSaer}	无量纲
环境介质（土壤、沉积物、悬浮物和污泥）-水分配	土壤-水分配系数	$K_{\text{soil-water}}$	$\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-3}$
	沉积物-水分配系数	$K_{\text{sed-water}}$	$\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-3}$
	悬浮物-水分配系数	$K_{\text{susp-water}}$	$\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-3}$
生物富集	蚯蚓生物富集系数	BCF_{worm}	$\text{L} \cdot \text{kg}_{\text{wwt}}^{-1}$
生物降解	活性污泥生物降解速率常数	$k_{\text{bio.stp}}$	d^{-1}
	土壤生物降解速率常数	$k_{\text{bio.soil}}$	d^{-1}

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

10.1.1 分配系数

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

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

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

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

10.1.2 降解速率常数

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

区域尺度还可考虑化学物质的光解，及在地表水和沉积物中的生物降解等去除过程。

10.1.3 特殊化学物质的考虑

大多数环境归趋与分配参数的估算模型针对有机物开发，对于金属类、无机物、可电离物质、颗粒物的评估应用须特别注意。也可参考国际上通行的方法开展特殊化学物质的评估。

对于金属类和无机物，还应根据更多信息评估环境归趋和分配。可电离物质评估时应考虑环境pH值对电离程度和归趋的影响。

分配系数的估算仅限于分子态物质。当化学物质以颗粒态（如粉尘）分布于环境时，使用分配系数法估算可能会低估土壤

和沉积物的暴露浓度、高估水中的暴露浓度。当粒径很小时则可能易于逸散进入大气。对于颗粒物的分配，应根据具体情况逐例评估。

10.2 区域尺度环境暴露浓度估算

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

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

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

10.3 局部环境暴露浓度估算

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

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

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

表5 局部尺度需要估算的预测环境浓度

环境介质	参数名称	参数符号	单位	用途	
				环境风险表征	PEC/ADD 估算
集中式 STP 微生物环境	STP 微生物 PEC	PEC_{stp}	$mg \cdot L^{-1}$	√	
大气	大气年均局部 PEC	$PEC_{air,ann.L}$	$mg \cdot L^{-1}$		$ADD_{inh.L}$
	大气年均总沉降通量	$DEP_{total,ann}$	$mg \cdot m^{-2} \cdot d^{-1}$		$PEC_{soil.L}$
地表水	地表水局部 PEC	$PEC_{water.L}$	$mg \cdot L^{-1}$	√	
	地表水年均局部 PEC	$PEC_{water,ann.L}$	$mg \cdot L^{-1}$		$ADD_{oral,water.L}$
沉积物	沉积物局部 PEC	$PEC_{sed.L}$	$mg \cdot kg^{-1}$	√	
土壤	土壤 30 d 平均局部 PEC	$PEC_{soil,30.L}$	$mg \cdot kg^{-1}$	√	
	土壤 180 d 平均局部 PEC	$PEC_{soil,180.L}$	$mg \cdot kg^{-1}$		$PEC_{ter,predator};$ $ADD_{oral,soil.L}$
地下水	地下水局部 PEC	$PEC_{grw.L}$	$mg \cdot L^{-1}$		$ADD_{oral,water.L}$
捕食动物	水生动物捕食者 PEC	$PEC_{aqu,predator}$	$mg \cdot kg_{wet}^{-1}$	√	
	陆生动物捕食者 PEC	$PEC_{ter,predator}$	$mg \cdot kg_{wet}^{-1}$	√	

10.3.1 集中式 STP 微生物暴露浓度

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

计算方法见附录D公式（D-40）。

10.3.2 局部大气暴露浓度预测

大气暴露评估内容包括：

（1）大气年均局部预测环境浓度（ $PEC_{\text{air,ann.L}}$ ）估算。 $PEC_{\text{air,ann.L}}$ 为距离排放源100 m处（假定100 m处为厂的外边界）的年均大气浓度。对于工业源，化学物质输入量取直接大气排放率（ $E_{\text{air.L}}$ ）和集中式STP大气排放率（ $E_{\text{stp.air}}$ ）的最大值。对于消费使用源，仅考虑集中式STP大气排放率（ $E_{\text{stp.air}}$ ）。不考虑沉降损失。

（2）大气年均总沉降通量（ $DEP_{\text{total,ann}}$ ）估算。 $DEP_{\text{total,ann}}$ 为距排放源100 m~1 km范围内大气年均干湿总沉降通量。对于工业源，化学物质输入量为直接大气排放量（ $E_{\text{air.L}}$ ）和集中式STP大气排放量（ $E_{\text{stp.air}}$ ）之和。对于消费使用源，仅考虑 $E_{\text{stp.air}}$ 。需同时考虑化学物质气态部分和气溶胶结合部分的干湿沉降。

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

计算方法见附录E的E.1。

10.3.3 局部地表水暴露浓度预测

地表水暴露评估的内容包括：

（1）地表水局部预测环境浓度（ $PEC_{\text{water.L}}$ ）。对于工业源，根据实际情况，其为直排地表水浓度或集中式STP排放后地表

水浓度。对于消费使用源， $PEC_{\text{water.L}}$ 为直排地表水浓度与集中式 STP 排放后地表水浓度的和。

(2) 地表水年均局部预测环境浓度 ($PEC_{\text{water.ann.L}}$)。

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

如果 $PEC_{\text{water.L}}$ 计算值大于化学物质的水溶解度，须分析并说明原因。

计算方法见附录 E 的 E.2。

10.3.4 局部沉积物暴露浓度预测

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

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

情形。

计算方法见附录 E 的 E.3。

10.3.5 局部土壤暴露浓度预测

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

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

如有其他土壤显著暴露途径的，应采用其他方法科学评估，但须详细说明。

10.3.6 局部地下水暴露浓度预测

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

10.3.7 捕食动物暴露浓度预测

捕食动物暴露浓度需估算：水生动物捕食者暴露浓度（ $PEC_{\text{aqu.predator}}$ ）和陆生动物捕食者的暴露浓度（ $PEC_{\text{ter.predator}}$ ）。捕食动物暴露浓度为食物中的浓度。

假定水生动物捕食者的典型食物链为：水→鱼→捕食动物（如鸟类、野鸭等），则 $PEC_{\text{aqu.predator}}$ 为鱼体浓度。鱼体浓度根据生物富集系数（ BCF ）计算。

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

计算公式见附录 E 的 E.6。

11 健康暴露评估

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

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

必要时，可基于区域PEC估算人体健康外暴露量，用于开展

远离排放源的健康暴露评估，估算方法参考局部尺度健康暴露评估方法。

表 6 局部尺度一般人群暴露途径和暴露量参数

暴露途径	参数名称	参数符号	单位	所需环境浓度
吸入	吸入途径日均暴露剂量	ADD_{inh}	$mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$	$PEC_{air,ann.L}$
饮水	饮水途径日均暴露剂量	$ADD_{oral,water}$	$mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$	$PEC_{water,ann.L}$; $PEC_{grw.L}$
摄食	摄食途径日均暴露剂量	$ADD_{oral,food}$	$mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$	$C_{fish.L}$
	摄入土壤的日均暴露剂量	$ADD_{oral,soil}$	$mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$	$PEC_{soil,180.L}$
总暴露量		ADD_T	$mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$	/

11.1 健康暴露参数

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

11.2 局部尺度暴露剂量估算

11.2.1 吸入暴露剂量估算

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

计算方法见附录 F 的 F.1。

11.2.2 饮水暴露剂量估算

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

计算方法见附录 F 的 F.2。

11.2.3 摄食（鱼）暴露剂量估算

假定人体通过摄食排放源附近水体中的鱼类发生暴露，使用鱼体浓度估算摄食途径暴露剂量。计算方法见附录 F 的 F.4。

如果考虑其他摄食（肉类、奶制品、农产品）途径，须详细说明估算过程与依据。

11.2.4 土壤摄取暴露剂量估算

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

计算公式见附录 F 的 F.6。

11.2.5 总暴露剂量估算

总暴露剂量为各个途径暴露量之和：

$$ADD_T = \sum ADD_n \quad (5)$$

式中： ADD_T ——各个暴露途径日均总暴露剂量， $mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$ ；

ADD_n ——第 n 种暴露途径的化学物质日均暴露剂量，

$mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$ 。

12 暴露评估报告

暴露评估报告主要包括以下几个方面：

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

附录 A 化学物质环境排放系数

化学物质环境排放系数受到多个因素影响，如行业领域、生命周期阶段、用途、操作条件等。本附录给出了不同行业领域在不同生命周期阶段、不同操作条件以及不同具体用途下的环境排放系数。

其中，行业领域包括：基础化工、化工合成、电子电气、个人/家庭用品、公共领域、皮革加工、金属提取精炼和加工、矿物油和燃料、胶片、聚合物、纸浆造纸和纸板、纺织加工、涂料油漆和清漆、土木和机械工程、其他。见表 A.1。

生命周期阶段包括：生产、加工使用、消费使用、固体废物利用处置。见表 A.1。

操作条件包括：密闭系统使用、物品添加使用、非广泛分散使用、广泛分散使用。见表 A.2。

此外，在部分行业领域内，还区分化学物质的具体用途给出不同的环境排放系数。如化工合成行业领域中区分中间体类和非中间体类，个人/家庭用品行业领域区分清洁剂/洗涤剂类和非清洁剂/洗涤剂类，给出不同的环境排放系数。

需要特别指出的是，由于国际社会对不同行业领域化学物质环境排放情况的研究和认识程度的不同，上述行业领域分类与我国国民经济行业分类无法一一对应，使用时应结合拟评估化学物质具体生产工艺、具体用途等选择最为适当的环境排放系数。

使用本附录选择化学物质环境排放系数时，应首先结合化学物质所处行业领域和生命周期阶段以及具体用途，参照表 A.1 查找对应的环境排放系数表（表 A.3—表 A.32），并根据表 A.2 给出的不同操作条件选择适当的化学物质环境排放系数。

表 A.1 不同行业领域化学物质环境排放系数总表

行业	A1 生产阶段	A2 配制阶段	A3 工业使用	A4 消费使用	A5 固体废物利用处置
IC1 基础化工	表 A.3	表 A.4	表 A.5	NA	NA
IC2 化工合成	表 A.3（非中间体类） 表 A.6（中间体类）	表 A.4	表 A.7	NA	NA
IC3 电子电气	表 A.3	表 A.4	表 A.8	NA	NA
IC4 个人/家庭用品	表 A.3（非清洁剂/洗涤剂类和非化妆品类，以及产量<1000 t·y ⁻¹ 的清洁剂/洗涤剂类和化妆品类） 表 A.9（产量≥1000 t·y ⁻¹ 的清洁剂/洗涤剂类和化妆品类）	表 A.4（非清洁剂/洗涤剂类和非化妆品类） 表 A.10（清洁剂/洗涤剂类和化妆品类）	NA	表 A.11	NA
IC5 公共领域	表 A.3（非清洁剂/洗涤剂类和非化妆品类，以及产量<1000 t·y ⁻¹ 的清洁剂/洗涤剂类和化妆品类） 表 A.9（产量≥1000 t·y ⁻¹ 的清洁剂/洗涤剂类和化妆品类）	表 A.4（非清洁剂/洗涤剂类） 表 A.10（清洁剂/洗涤剂类）	表 A.12	NA	NA
IC6 皮革加工	表 A.3（非着色剂类） 表 A.13（着色剂类）	表 A.4	表 A.14	NA	NA
IC7 金属提取、精炼和加工	表 A.3	表 A.4（非热传导剂、润滑油及添加剂类） 表 A.15（热传导剂、润滑油及添加剂类）	表 A.16	NA	NA

行业	A1 生产阶段	A2 配制阶段	A3 工业使用	A4 消费使用	A5 固体废物利用处置
IC8 矿物油和燃料	表 A.3	表 A.4	表 A.17	表 A.18	NA
IC9 胶片	表 A.3	表 A.4 (显影水基溶液) 表 A.19 (光化学物质及其他用于固体材料生产的化学物质)	表 A.20	表 A.21	表 A.22
IC10 聚合物	表 A.3 或表 A.23	表 A.4 表 A.19 (混炼等配制过程)	表 A.23 表 A.24	NA	NC
IC11 纸浆、造纸和纸板	表 A.3 (非着色剂类) 表 A.13 (着色剂类)	表 A.4	表 A.25 表 A.26	NA	表 A.27
IC12 纺织加工	表 A.3 (非着色剂类) 表 A.13 (着色剂类)	表 A.4	表 A.28	表 A.29	NA
IC13 涂料、油漆和清漆	表 A.3	表 A.4	表 A.30	表 A.31	NA
IC14 土木和机械工程	表 A.3	表 A.4	表 A.32	表 A.32	NA
IC0 其他	表 A.3	表 A.4	表 A.32	NC	NC

注：NA 为不适用，NC 为暂未考虑。

表 A.2 操作条件分类 (MC)

MC 编号	MC 名称	MC 亚类	生命周期阶段	MC 亚类描述
MC1	密闭系统使用	MC1b	生产	分离 (离开反应容器和设备) 后在现场储存的中间体, 或连续生产的非中间体
			配制	使用专用设备且基本无清洗操作
		MC1c	生产	分离后不在现场储存的中间体, 或使用专用设备生产非中间体类物质
			配制	使用专用设备且清洗频繁
MC2	物品添加使用	/	配制	添加进入物品等基质
			工业使用	工业用途, 或使用非专用设备加工使用中间体
MC3	非广泛分散使用	/	生产	使用非专用设备
			配制	使用非专用设备
			使用	非广泛分散性质的工业使用, 或使用非专用设备加工使用中间体
MC4	广泛分散使用	/	使用	消费使用 (无排放控制措施)

一、基础化工

(一) 生产：表 A. 3。

表 A. 3 生产（一般类）

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

(二) 配制：表 A. 4。

表 A. 4 配制（一般类）

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

(三) 工业使用: 表 A. 5。

表 A.5 工业使用 (基础化工)

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

^a 涵盖相关固体废物 (如废催化剂) 回收利用过程中化学物质的排放系数。

(四) 消费使用: 不适用。

(五) 固体废物利用处置: 不适用。

二、化工合成

(一) 生产

非中间体类: 表 A. 3;

中间体类: 表 A. 6。

表 A.6 生产 (中间体类)

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

环境介质	生产工艺	蒸气压 (Pa)	生产量 (t·y ⁻¹)	排放系数		
				MCs	MC=1b	MC=1c
	干法	/	/	0	/	/
土壤	/	/	/	/	0.00001	0.0001

(二) 配制: 表 A. 4。

(三) 工业使用: 表 A. 7。

表 A.7 工业使用 (化工合成)

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

^a没有 MC 时, 采用的默认值。

(四) 消费使用: 不适用。

(五) 固体废物利用处置: 不适用。

三、电子电气

(一) 生产: 表 A. 3。

(二) 配制: 表 A. 4。

(三) 工业使用: 表 A. 8。

表 A.8 工业使用 (电子电气)

环境介质	蒸气压 (Pa)	排放系数	
		MC = 2	MC = 3 ^a
空气	<100	0.0005	0.0005
	≥100	0.0005	0.001
废水	/	0.0001	0.005
土壤	/	0.0001	0.01

^a没有MC时, 采用的默认值。

(四) 消费使用：不适用。

(五) 固体废物利用处置：不适用。

四、个人/家庭用品

(一) 生产

非清洁剂/洗涤剂类和非化妆品类，以及产量 $<1000 \text{ t} \cdot \text{y}^{-1}$ 的清洁剂/洗涤剂类和化妆品类：表 A. 3；

产量 $\geq 1000 \text{ t} \cdot \text{y}^{-1}$ 的清洁剂/洗涤剂类和化妆品类：表 A. 9。

表 A. 9 生产（产量 $\geq 1000 \text{ t} \cdot \text{y}^{-1}$ 的清洁剂/洗涤剂类和化妆品类）

环境介质	排放系数	
	批处理工艺 ^a	连续工艺 ^b
空气	0.000001	0.000001
废水	0.003	0.001
固体废物	0	0

^a如：非离子表面活性剂的乙氧化处理、两性的和阳离子型表面活性剂的生产。
^b如：阴离子表面活性剂的磺化和硫化工艺。

(二) 配制

非清洁剂/洗涤剂类和非化妆品类：表 A. 4；

清洁剂/洗涤剂类和化妆品类：表 A. 10。

表 A.10 配制（清洁剂/洗涤剂类和化妆品类）

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

(三) 工业使用：不适用。

(四) 消费使用：表 A.11。

表 A.11 消费使用（个人/家庭用品）

环境介质	用途	水溶解度(mg·L ⁻¹)	蒸气压 (Pa)	排放系数
空气	胶黏剂、黏合剂等 ^a	/	/	0
	气溶胶喷涂剂	/	/	1
	抗冻剂	/	/	0.0005
	润滑剂和添加剂	/	<5000	0
		/	≥5000	0.05
	气味剂	/	<100	0.05
		/	100-2500	0.2
		/	2500-10000	0.5
		/	≥10000	0.9
	溶剂及其他	<10	<10	0.005
			10-100	0.015
			100-1000	0.15
			1000-10000	0.4
			≥10000	0.6
		10-100	<10	0.0015
			10-100	0.075
			100-1000	0.125
			1000-10000	0.25
			≥10000	0.4
		100-1000	<10	0.0015
			10-100	0.025
			100-1000	0.1
			1000-10000	0.15
			≥10000	0.225
		≥1000	<10	0.00075
			10-100	0.03
			100-1000	0.075
1000-10000			0.125	
≥10000			0.175	
地表水	抗冻剂、润滑剂和添加剂（汽车用品）			0.0005
废水	胶黏剂、黏合剂	<25	/	0
		≥25	/	0.005
	气溶胶喷涂剂、抗冻剂、润滑	/	/	0

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

环境介质	用途	水溶解度(mg·L ⁻¹)	蒸气压 (Pa)	排放系数
	着色剂 (其他)	/	/	0.01
	络合剂	/	/	0.0001
	润滑剂和添加剂	/	/	0.002
	溶剂及其他	/	<10	0.2
		/	10-100	0.1
		/	100-1000	0.05
		/	1000-10000	0.005
		/	≥10000	0.002
*胶黏剂、黏合剂、防静电剂、漂白剂、清洁剂及添加剂、着色剂、络合剂、化妆品、软化剂、表面活性剂。				

(五) 固体废物利用处置：不适用。

五、公共领域

(一) 生产

非清洁剂/洗涤剂类和非化妆品类，以及产量<1000 t·y⁻¹的清洁剂/洗涤剂类和化妆品类：表 A. 3；

产量≥1000 t·y⁻¹的清洁剂/洗涤剂类和化妆品类：表 A. 9。

(二) 配制

非清洁剂/洗涤剂类：表 A. 4；

清洁剂/洗涤剂类：表 A. 10。

(三) 工业使用：表 A. 12。

表 A.12 工业使用（公共领域）

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

(四) 消费使用：不适用。

(五) 固体废物利用处置：不适用。

六、皮革加工

(一) 生产

非着色剂类：表 A. 3；

着色剂类：表 A. 13。

表 A.13 生产（着色剂类）

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

(二) 配制：表 A. 4。

(三) 工业使用：表 A. 14。

表 A.14 工业使用（皮革加工）

环境介质	水溶解度 (mg·L ⁻¹)	蒸气压 (Pa)	排放系数		
			MCs	MC = 2	MC = 3 ^a
空气	<100	<100	0.001	/	/
	<100	≥100	0.01	/	/
	≥100	/	0	/	/
废水	<100	/	/	0.05	0.9
	100-1000	/	/	0.15	0.99
	≥1000	/	/	0.25	0.99
土壤	/	/	0.01	/	/

^a 没有 MC 时，采用的默认值。

(四) 消费使用：不适用。

(五) 固体废物利用处置：不适用。

七、金属提取、精炼和加工

(一) 生产：表 A. 3。

(二) 配制

非热传导剂、润滑油及添加剂类：A. 4；

热传导剂、润滑油及添加剂类：A. 15。

表 A.15 配制（热传导剂、润滑油及添加剂）

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

（三）工业使用：表 A.16。

表 A.16 工业使用（金属提取、精炼和加工）

用途	环境介质	水溶解度 (mg·L ⁻¹)	lg HENRY	排放系数			
				MCs	MC = 2	MC = 3 ^a	
非热传导剂、非 润滑油及添加 剂	空气	/	/	/	0	0.25	
	废水	<100	/	/	0.05	0.5	
		100-1000	/	/	0.1	0.5	
		≥1000	/	/	0.25	0.5	
	土壤	/	/	/	0	0.05	
热传导剂、润滑 油及添加剂	空气	/	<2	0.0002	/	/	
		/	≥2	0.002	/	/	
	废水	纯油性	/	/	0.185	/	/
		水性及其他	/	/	0.316	/	/
	土壤	/	/	/	0.0001	/	/

^a 没有 MC 时，采用的默认值。

（四）消费使用：不适用。

（五）固体废物利用处置：不适用。

八、矿物油和燃料

（一）生产：表 A.3。

（二）配制：表 A.4。

（三）工业使用：表 A.17。

表 A.17 工业使用（矿物油和燃料）

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

（四）消费使用：表 A.18。

表 A.18 消费使用（矿物油和燃料）

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

（五）固体废物利用处置：不适用。

九、胶片

（一）生产：表 A.3。

（二）配制

显影水基溶液：表 A.4；

光化学物质及其他用于固体材料生产的化学物质：表 A.19。

表 A.19 配制（光化学物质及用于固体材料生产的化学物质）

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

（三）工业使用：表 A. 20。

表 A.20 工业使用（胶片）

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

^a 没有 MC 时，采用的默认值。

（四）消费使用：表 A. 21。

表 A.21 消费使用（胶片）

环境介质	排放系数
空气	0
废水	0.4
土壤	0

注：仅适用于水溶液中光化学物质的排放测算。

(五) 固体废物利用处置：表 A. 22。

表 A.22 固体废物利用处置^a (胶片)

环境介质	蒸气压 (Pa)	排放系数 ^b
空气	<1	0.000005
	1-10	0.000025
	10-100	0.00075
	100-1000	0.0025
	≥1000	0.01
废水	/	0.2
土壤	/	0

注：^a 仅适用于水溶液中光化学物质的排放测算。
^b 仅为相关固体废物回收利用过程的化学物质排放系数。

十、聚合物

(一) 生产：表 A. 3 或表 A. 23。

(二) 配制：表 A. 4 或表 A. 19 (混炼)。

(三) 工业使用：聚合反应过程中单体、催化剂、引发剂、抑制剂、延迟剂、链转移剂、硫化剂等的使用见表 A. 23，聚合物加工见表 A. 24。

表 A.23 工业使用 (聚合反应过程)

环境介质	理化参数		排放系数					
	蒸气压 (Pa)	水溶解度 (mg·L ⁻¹)	类别I		类别II		类别III	
			湿法	干法	湿法	干法	湿法	干法
空气	<1	/	0.00001	0.00001	0	0	0	0
	1-10	/	0.0001	0.0001	0	0	0	0
	10-100	/	0.001	0.001	0	0	0	0
	100-1000	/	0.01	0.01	0.0005	0.0005	0	0
	1000-10000	/	0.05	0.05	0.001	0.001	0.0005	0.0005
	≥10000	/	0.05	0.05	0.01	0.01	0.001	0.001
废水	/	<10	0.00001	0	0.005	0	0.0005	0
	/	10-100	0.0001	0	0.01	0	0.001	0
	/	100-1000	0.001	0	0.025	0	0.0025	0
	/	≥1000	0.01	0	0.05	0	0.005	0
土壤	<5000	/	0	0	0.0005	0.0005	0.00025	0.00025
	≥5000	/	0	0	0	0	0	0

注：聚合工业中聚合物生产分为：A) 聚合反应，包括：A.1) 湿法 (如：乳剂聚合)，A.2) 干法 (如：气相聚合)；B) 其他 (如：加聚，缩聚)。所有类型化学物质的用途分类都是：过程调控，按具体功能分为三种：I 单体，II 催化剂，III 引发剂、抑制剂、延迟剂、链转移剂、硫化剂等。

表 A.24 工业使用（聚合物加工）

环境介质	蒸气压 (Pa)	沸点 (°C)	排放系数		物质类型	
			A	B		
空气	<1	<300或未知	0.001	0	I	
		≥300	0.0005	0		
	1-100	<300或未知	0.0025	0		
		≥300	0.001	0		
	≥100	<300或未知	0.01	0	II	
		≥300	0.005	0		
		<400或未知	0.01	/		
		≥400	0.005	/		
	<100	/	0.1	0.1	III	
	100-1000	/	0.25	0.25		
	1000-10000	/	0.5	0.5		
	≥10000	/	0.75	0.75		
	<1	<300或未知	0.01	0	IV	
			≥300	0.005		0
		1-100	<300或未知	0.025		0
			≥300	0.01		0
≥100		<300或未知	0.1	0		
		≥300	0.05	0		
<100	/	/	0.075	V		
	100-1000	/	0.15			
	1000-10000	/	0.25			
	≥10000	/	0.35			
废水	/	/	0.0005	0.0005	I	
	/	/	0.001	0	II	
	/	/	0	0	III	
	/	/	0.0005	0.0005	IV	
	/	/	/	0.00005	V	
土壤	/	/	0.0001	0.0001	I	
	/	/	0.0005	0	II	
	/	/	0.00001	0.00001	III	
	/	/	0.001	0.001	IV	
	/	/	/	0.00001	V	

注：聚合物加工（成型）分为两种：A热塑型塑料加工，B热固性树脂（预聚物）处理，主要考虑以下5种类型：I（A，B）添加剂，包括抗静电剂、阻燃剂、稳定剂及其他，颜料（着色剂），填料；II（A）增塑剂（软化剂）；III（A，B）溶剂；IV（A，B）加工助剂，包括抗裂剂和抗粘合剂、润滑油和添加剂；V（B）固化剂（反应调节剂，如引发剂）、交联剂（反应调节剂：单体）。

(四) 消费使用: 不适用。

(五) 固体废物利用处置: 不适用。

十一、纸浆、造纸和纸板

(一) 生产

非着色剂类: 表 A. 3;

着色剂类: 表 A. 9。

(二) 配制: 表 A. 4。

(三) 工业使用: 印刷及类似过程见表 A. 25, 纸浆、纸和纸板业见表 A. 26。

表 A.25 工业使用 (印刷及类似过程)

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

^a 没有 MC 时, 采用的默认值。

表 A.26 工业使用（纸浆、纸和纸板业）

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

^a 没有 MC 时，采用的默认值。

（四）消费使用：不适用。

(五) 固体废物利用处置：表 A. 27。

表 A.27 固体废物利用处置（造纸）

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

^a 仅为相关固体废物回收利用过程的化学物质排放系数。

十二、纺织加工

(一) 生产

非着色剂类：表 A. 3；

着色剂类：表 A. 13。

(二) 配制：表 A. 4。

(三) 工业使用：表 A. 28。

表 A.28 工业使用（纺织加工）

环境介质	判别参数		排放系数	
	水溶解度 (mg·L ⁻¹)	蒸气压 (Pa)	非着色剂	着色剂
空气	<100	<100	0.05	/
		100-1000	0.15	/
		≥1000	0.4	/
	100-1000	<100	0.025	/
		100-1000	0.05	/
		≥1000	0.15	/
	1000-10000	<100	0.01	/
		100-1000	0.025	/
		≥1000	0.05	/
	≥10000	<100	0.005	/
		100-1000	0.01	/
		≥1000	0.025	/
	浸染	/	/	0.0007
轧染	热熔胶物质或未知类型	/	/	0.05
	其他物质	/	/	0.0025
	印花	/	/	0.0025
废水 ^a	<100	<100	0.85	/
		100-1000	0.75	/
		≥1000	0.5	/
	100-1000	<100	0.875	/
		100-1000	0.85	/
		≥1000	0.75	/
	1000-10000	<100	0.9	/
		100-1000	0.875	/
		≥1000	0.85	/
	≥10000	/	0.95	/
	/	/	/	0.005
土壤	<100	<100	0.05	/
		100-500	0.15	/
		≥500	0.4	/
	≥100	<100	0.025	/
		100-500	0.05	/
		≥500	0.15	/

^a 着色剂废水排放系数(EF)=染色工序排放系数(E.1)+处理、清洗工序排放系数(E.2)
 式中：E.1——染色工序废水排放系数，计算方法为 $E.1 = A / (1 + K \times B)$ 。其中A为常数，K为平衡常数，B为1/浴比（浴比默认为10 kg 织物/1 L溶液），见表A.28工业使用（纺织加工参数值）。
 E.2——处理、清洗工序废水排放系数，见表A.28工业使用（纺织加工参数值）。

表 A.28 工业使用（纺织加工参数值）

染料类型	着色剂印染工艺	参数值			
		K	A	B	E.2
分散染料	轧染	115	5	1	0.055
	印花	115	2	0.5	0.12
直接染料	浸染	73	1	0.1 ^a	0.01
活性染料-毛料	浸染	190	1	0.1 ^a	0.01
活性染料-棉线	浸染	23	1	0.1 ^a	0.01
活性染料-一般织物	浸染	57	1	0.1 ^a	0.01
还原染料	轧染	190	5	1	0.055
	印花	190	2	0.5	0.12
硫化染料	轧染	40	5	1	0.055
	印花	40	2	0.5	0.12
酸性染料（1个SO ₃ ）	浸染	90	1	0.1 ^a	0.01
酸性染料（>1个SO ₃ ）	浸染	190	1	0.1 ^a	0.01
碱性染料	浸染	990	1	0.1 ^a	0.01
偶氮染料	轧染	30	5	1	0.055
	印花	30	2	0.5	0.12
金属络合物	浸染	150	1	0.1 ^a	0.01
颜料	轧染	5000	5	1	0.055
	印花	5000	2	0.5	0.12
未知的低溶解度物质	轧染	190	5	1	0.055
	印花	190	2	0.5	0.12
含酸性基团的未知物质	浸染	90	1	0.1 ^a	0.01

^a默认值。

（四）消费使用：表 A.29。

表 A.29 消费使用（纺织加工）

环境介质	水溶解度（mg·L ⁻¹ ）	排放系数
空气	/	0
废水	<250	0.1
	250-1000	0.15
	1000-5000	0.2
	≥5000	0.3
土壤	/	0

注：只适用着色剂。

（五）固体废物利用处置：不适用。

十三、涂料、油漆和清漆

(一) 生产：表 A. 3。

(二) 配制：表 A. 4。

(三) 工业使用：表 A. 30。

表 A.30 工业使用（涂料、油漆和清漆）

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

(四) 消费使用: 表 A. 31。

表 A.31 消费使用 (涂料、油漆和清漆)

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

(五) 固体废物利用处置: 不适用。

十四、土木和机械工程

(一) 生产: 表 A. 3。

(二) 配制: 表 A. 4。

(三) 工业使用：表 A. 32。

表 A.32 工业使用（土木和机械工程）

环境介质	水溶解度 (mg·L ⁻¹)	蒸气压 (Pa)	排放系数		
			MC=2	MC=3 ^a	MC=4
空气	<100	<10	0.0001	0.001	0.01
		10-100	0.001	0.01	0.1
		100-1000	0.01	0.1	0.25
		1000-10000	0.1	0.5	0.7
		≥10000	0.5	0.75	0.9
	100-1000	<10	0.00001	0.0001	0.001
		10-100	0.0001	0.001	0.05
		100-1000	0.001	0.05	0.1
		1000-10000	0.05	0.1	0.5
		≥10000	0.25	0.5	0.75
	≥1000	<10	0	0.00001	0.0001
		10-100	0.00001	0.0001	0.001
		100-1000	0.0001	0.001	0.01
		1000-10000	0.001	0.01	0.1
		≥10000	0.01	0.1	0.5
废水	<100	<10	0.01	0.1	0.5
		10-100	0.001	0.01	0.1
		100-1000	0.0001	0.001	0.01
		1000-10000	0.00001	0.0001	0.001
		≥10000	0	0.00001	0.0001
	100-1000	<10	0.25	0.5	0.75
		10-100	0.05	0.1	0.5
		100-1000	0.001	0.01	0.1
		1000-10000	0.0001	0.001	0.05
		≥10000	0.00001	0.0001	0.001
	≥1000	<10	0.5	0.75	0.9
		10-100	0.1	0.5	0.7
		100-1000	0.01	0.1	0.25
		1000-10000	0.001	0.01	0.1
		≥10000	0.0001	0.001	0.01
土壤	<100	<10	0.005	0.01	0.05

环境介质	水溶解度 (mg·L ⁻¹)	蒸气压 (Pa)	排放系数		
			MC=2	MC=3 ^a	MC=4
		10-100	0.001	0.005	0.01
		100-1000	0.0005	0.001	0.005
		1000-10000	0	0.0005	0.001
		≥10000	0	0	0.0005
	100-1000	<10	0.001	0.005	0.01
		10-100	0.0005	0.001	0.005
		100-1000	0	0.0005	0.001
		1000-10000	0	0	0.0005
		≥10000	0	0	0.0001
	≥1000	<10	0.0005	0.001	0.005
		10-100	0	0.0005	0.001
		100-1000	0	0	0.0005
		1000-10000	0	0	0.0001
		≥10000	0	0	0
	^a 没有 MC 时, 采用的默认值。				

(四) 消费使用: 表 A. 32。

(五) 固体废物利用处置: 不适用。

十五、其他

(一) 生产: 表 A. 3。

(二) 配制: 表 A. 4。

(三) 工业使用: 表 A. 32。

(四) 消费使用: 暂无。

(五) 固体废物利用处置: 暂无。

附录 B 暴露参数推荐值

表 B.1 集中式 STP 暴露参数

参数	符号	单位	数值
一般参数			
污水日处理量	$EFFLUEN_{stp}$	$m^3 \cdot d^{-1}$	2000
风速	$WIND_{speed}$	$m \cdot s^{-1}$	2
进水 (RS)			
BOD ₅	BOD_{RS}	$g \cdot L^{-1}$	0.15
悬浮物密度	ρ_{RS}	$kg \cdot L^{-3}$	1.6
悬浮物浓度	SS_{RS}	$kg \cdot m^{-3}$	0.2
悬浮物有机碳含量	Fo_{CRS}	$kg \cdot kg^{-1}$	0.18
初沉池 (PS)			
池深	h_{PS}	m	4
水力停留时间	HRT_{PS}	h	2
污泥密度	ρ_{PS}	$kg \cdot L^{-3}$	1.6
曝气池 (O)			
池深	h_O	m	3
污泥密度	ρ_O	$kg \cdot L^{-3}$	1.6
悬浮物 (污泥混合液) 浓度	$MLSS_O$	$kg \cdot m^{-3}$	3
污泥有机碳质量分数	Fo_{CO}	$kg \cdot kg^{-1}$	0.19
水力停留时间	HRT_O	h	10
二沉池 (SLS)			
池深	h_{SLS}	m	3
污泥密度	ρ_{SLS}	$kg \cdot L^{-3}$	1.6
悬浮物浓度	SS_{SLS}	$kg \cdot m^{-3}$	0.02
水力停留时间	HRT_{SLS}	h	6
污泥有机碳质量分数	Fo_{CSLS}	$kg \cdot kg^{-1}$	0.19

表 B.2 局部尺度环境暴露参数

参数	符号	单位	数值
一般			
固相密度	ρ_{solid}	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	2500
水相密度	ρ_{water}	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	1000
大气密度	ρ_{air}	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	1.3
环境温度	T_{env}	$^{\circ}\text{C}$	10
降雨量	RAINrate	$\text{mm}\cdot\text{y}^{-1}$	674
地表水			
水中悬浮物浓度（干重）	$\text{SUSP}_{\text{water}}$	$\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$	15
河流流量	FLOW	$\text{m}^3\cdot\text{d}^{-1}$	18000
悬浮物			
悬浮物中固体的体积分数	$F_{\text{solid}_{\text{susp}}}$	$\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$	0.1
悬浮物中水的体积分数	$F_{\text{water}_{\text{susp}}}$	$\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$	0.9
悬浮固体中有机碳质量分数	$F_{\text{OC}_{\text{susp}}}$	$\text{kg}\cdot\text{kg}^{-1}$	0.1
沉积物			
沉积物中固体的体积分数	$F_{\text{solid}_{\text{sed}}}$	$\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$	0.2
沉积物中水的体积分数	$F_{\text{water}_{\text{sed}}}$	$\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$	0.8
沉积物固体中有机碳质量分数	$F_{\text{OC}_{\text{sed}}}$	$\text{kg}\cdot\text{kg}^{-1}$	0.05
土壤			
土壤中固体的体积分数	$F_{\text{solid}_{\text{soil}}}$	$\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$	0.6
土壤中水的体积分数	$F_{\text{water}_{\text{soil}}}$	$\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$	0.2
土壤中空气的体积分数	$F_{\text{air}_{\text{soil}}}$	$\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$	0.2
土壤固体中有机碳质量分数	$F_{\text{OC}_{\text{soil}}}$	$\text{kg}\cdot\text{kg}^{-1}$	0.02
表层土壤深度	$\text{DEPTH}_{\text{soil}}$	m	0.2
污泥（干重）的年施用率	$\text{APPL}_{\text{sludge}}$	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{y}^{-1}$	0.75

表 B.3 人体暴露参数（成人）

参数	符号	单位	数值
呼吸速率	IR_{air}	$\text{m}^3\cdot\text{d}^{-1}$	0.65
鱼摄入率	IR_{fish}	$\text{kg}\cdot\text{d}^{-1}$	0.03
饮水摄入率	IR_{water}	$\text{L}\cdot\text{d}^{-1}$	1.85
每日暴露时长	ET	$\text{h}\cdot\text{d}^{-1}$	24
暴露频率	EF	$\text{d}\cdot\text{y}^{-1}$	365
暴露持续时间	ED	y	70
体重	BW	kg	60.6
平均暴露时间	AT	d	$\text{ED}\times\text{EF}$

附录 C 环境行为与归趋参数计算

C.1 蒸气压和水溶解度温度校正

C.1.1 蒸气压的校正

将蒸气压 (VP) 从试验温度校正到环境温度:

$$VP = VP_{\text{test}} \times e^{\frac{\Delta_{\text{vap}}H_m}{R} \left(\frac{1}{273+T_{\text{vptest}}} - \frac{1}{273+T_{\text{env}}} \right)} \quad (\text{C-1})$$

式中: VP ——环境温度下的蒸气压, Pa;

$\Delta_{\text{vap}}H_m$ ——蒸发焓, $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$ 。默认为 50000;

VP_{test} ——试验温度下的蒸气压, Pa;

R ——气体常数, $8.314 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$;

T_{vptest} ——蒸气压试验温度, $^{\circ}\text{C}$;

T_{env} ——环境温度, $^{\circ}\text{C}$ 。推荐值见表 B.2。

C.1.2 水溶解度的校正

将水溶解度从试验温度校正到环境温度:

$$SOL = SOL_{\text{test}} \times e^{\frac{\Delta_{\text{sol}}H_m}{R} \left(\frac{1}{273+T_{\text{soltest}}} - \frac{1}{273+T_{\text{env}}} \right)} \quad (\text{C-2})$$

式中: SOL ——环境温度下的水溶解度, $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$;

$\Delta_{\text{sol}}H_m$ ——溶解焓, $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$ 。默认为 10000;

SOL_{test} ——试验温度下的水溶解度, $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$;

R ——气体常数, $8.314 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$;

T_{soltest} ——水溶解度试验温度, $^{\circ}\text{C}$;

T_{env} ——环境温度, $^{\circ}\text{C}$ 。推荐值见表 B.2。

C.1.3 环境介质密度的计算

环境介质 (土壤、沉积物、悬浮物) 的密度计算方法见公式 (C-3)。

$$\rho_{\text{comp}} = F_{\text{soild}}_{\text{comp}} \times \rho_{\text{solid}} + F_{\text{water}}_{\text{comp}} \times \rho_{\text{water}} + F_{\text{air}}_{\text{comp}} \times \rho_{\text{air}} \quad (\text{C-3})$$

其中 $\text{comp} \in \{\text{soil, sed, susp}\}$

式中: ρ_{comp} ——环境介质 comp (土壤、沉积物、悬浮物质) 密度 (以湿重计), $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$;

$F_{\text{soild}}_{\text{comp}}$, $F_{\text{water}}_{\text{comp}}$ 和 $F_{\text{air}}_{\text{comp}}$ ——分别为环境介质 comp (土壤、沉积物、悬浮物)

中固体、水和空气的体积分数, $\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$ 。推荐值见表 B.2;

ρ_{solid} , ρ_{water} 和 ρ_{air} ——分别为固体、水和空气的密度, $\text{kg}^3 \cdot \text{m}^{-3}$ 。推荐值见表 B.2。

C.2 环境介质中的分配

C.2.1 气-水分配

(1) 亨利常数

亨利常数 (HENRY) 采用公式 (C-4) 计算:

$$HENRY = \frac{VP \cdot MW}{SOL} \quad (\text{C-4})$$

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

VP ——蒸气压, Pa 。校正方法见公式 (C-1);

MW ——相对分子质量, $\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$;

SOL ——水溶解度, $\text{mg} \cdot \text{L}^{-1}$ 。

(2) 气-水分配系数

化学物质气-水分配系数 ($K_{\text{air-water}}$) 采用公式 (C-5) 计算:

$$K_{\text{air-water}} = \frac{HENRY}{R \times (273 + T_{\text{env}})} \quad (\text{C-5})$$

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

$HENRY$ ——亨利常数, $\text{Pa} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ 。计算方法见公式 (C-4);

R ——气体常数, $8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$;

T_{env} ——环境温度, $^{\circ}\text{C}$ 。推荐值见表 B.2。

C.2.2 气-气溶胶分配

大气中化学物质吸附于气溶胶颗粒的比例 ($F_{\text{ass aer}}$) 采用公式 (C-6) 计算:

$$F_{\text{ass aer}} = \frac{CON_{\text{junge}} \times SURF_{\text{aer}}}{VPL + CON_{\text{junge}} \times SURF_{\text{aer}}} \quad (\text{C-6})$$

$$VPL = \frac{VP}{e^{6.79 \cdot (1 - \frac{273 + TEMP_{\text{melt}}}{273 + T_{\text{env}}})}} \quad (\text{C-7})$$

式中: $F_{\text{ass aer}}$ ——大气中化学物质吸附于气溶胶颗粒的比例, 无量纲;

CON_{junge} ——Junge 方程常数, $\text{Pa} \cdot \text{m}$;

$SURF_{\text{aer}}$ ——气溶胶颗粒的表面积, $\text{m}^2 \cdot \text{m}^{-3}$ 。其中, $CON_{\text{junge}} \times SURF_{\text{aer}} = 10^{-4} \text{ Pa}$;

VPL ——蒸气压, Pa 。对于气体和液体, $VPL = VP$ 。对于固体, 使用公式 (C-7) 计算;

VP ——环境温度下的蒸气压, Pa 。计算方法见公式 (C-1);

$TEMP_{\text{melt}}$ ——熔点, $^{\circ}\text{C}$ 。默认为 318;

T_{env} ——环境温度, $^{\circ}\text{C}$ 。推荐值见表 B.2。

C.2.3 环境介质（土壤、沉积物、悬浮物和污泥）-水分配

(1) 固-水分配系数

化学物质的固-水分配系数 (Kp_{comp})，采用公式 (C-8) 计算：

$$Kp_{\text{comp}} = Foc_{\text{comp}} \times Koc \quad (\text{C-8})$$

其中 $\text{comp} \in \{\text{soil, sed, susp, sludge}\}$

式中： Kp_{comp} ——化学物质在环境介质（土壤、沉积物、悬浮物、污泥）中的固-水分配系数， $\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$ ；

Foc_{comp} ——环境介质（土壤、沉积物、悬浮物，污泥）中有机碳质量分数， $\text{kg}\cdot\text{kg}^{-1}$ 。

Foc_{sludge} 见表 B.1，其他见表 B.2；

Koc ——有机碳-水分配系数， $\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$ 。

(2) 环境介质（土壤、沉积物、悬浮物）-水分配

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

$$K_{\text{comp-water}} = Fair_{\text{comp}} \times K_{\text{air-water}} + Fwater_{\text{comp}} + Fsolid_{\text{comp}} \times \frac{Kp_{\text{comp}}}{1000} \times \rho_{\text{solid}} \quad (\text{C-9})$$

其中 $\text{comp} \in \{\text{soil, sed, susp}\}$

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

$Fair_{\text{comp}}$ ， $Fwater_{\text{comp}}$ 和 $Fsoil_{\text{comp}}$ ——分别为环境介质（土壤、沉积物、悬浮物）中气、水和土壤的体积分数， $\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$ 。推荐值见表 B.2；

$K_{\text{air-water}}$ ——气-水分配系数，无量纲。计算方法见公式 (C-5)；

Kp_{comp} ——化学物质在土壤、沉积物或悬浮物中的固-水分配系数， $\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$ 。计算方法见公式 (C-8)；

ρ_{solid} ——固体的密度， $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ 。推荐值见表 B.2。

C.2.4 蚯蚓生物富集系数

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

$$BCF_{\text{worm}} = (0.84 + 0.012K_{\text{ow}})/\rho_{\text{worm}} \quad (\text{C-10})$$

式中： BCF_{worm} ——蚯蚓的生物富集系数（以湿重计）， $\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$ ；

K_{ow} ——化学物质正辛醇-水分配系数，无量纲；

ρ_{worm} ——蚯蚓密度（以湿重计）， $\text{kg}\cdot\text{L}^{-1}$ 。默认为 1。

C.3 环境介质中的降解

C.3.1 降解速率常数与降解半衰期的换算

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

$$k = 0.693/DT_{50} \quad (\text{C-11})$$

式中: k ——化学物质生物降解速率常数, d^{-1} ;

DT_{50} ——化学物质降解半衰期, d 。

C.3.2 水解

对于许多化学物质,水解速率依赖于特定环境的 pH 值和温度,以及土壤的含水率。

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

$$k_{\text{hydr.water}} = k_{\text{hydr.water.test}} \times e^{0.08 \times (T_{\text{env}} - T_{\text{test}})} \quad (\text{C-12})$$

式中: $k_{\text{hydr.water}}$ ——环境温度下化学物质的水解速率常数, h^{-1} ;

$k_{\text{hydr.water.test}}$ ——水解试验温度下化学物质的水解速率常数, h^{-1} ;

T_{env} ——环境温度, K。推荐值见表 D.2;

T_{test} ——水解试验温度, K。

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

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

C.3.3 活性污泥中的降解

活性污泥中的降解速率常数为水解速率和生物降解速率常数之和:

$$k_{\text{deg.stp}} = k_{\text{bio.stp}} + k_{\text{hydr.water}} \quad (\text{C-13})$$

式中: $k_{\text{deg.stp}}$ ——化学物质在活性污泥中的降解速率常数, h^{-1} ;

$k_{\text{bio.stp}}$ ——化学物质在活性污泥中的好氧生物降解速率常数, h^{-1} 。计算方法见表 C.1;

$k_{\text{hydr.water}}$ ——化学物质的水解速率常数, h^{-1} 。计算方法见公式(C-12),默认为 0。

表 C.1 化学物质在污水处理厂活性污泥中的好氧生物降解速率常数外推方法

测试结果	$k_{\text{bio.stp}}$ (h^{-1})
快速生物降解	1
快速生物降解试验 28d 通过,但未通过 10d 观察期	0.3
28d 快速生物降解率 $\geq 20\%$, 或固有生物降解率 $\geq 70\%$	0.1

固有生物降解率 $\geq 20\%$	0.03
不可生物降解	1×10^{-4}

C.3.4 土壤中的生物降解

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

表 C.2 化学物质在土壤中的生物降解半衰期外推方法

测试结果	DT_{50} (d)			
	$Kp_{soil} \leq 100$	$100 < Kp_{soil} \leq 1000$	$1000 < Kp_{soil} \leq 10000$	$Kp_{soil} > 10000$
快速生物降解	30	300	3000	30000
快速生物降解试验 28d 通过， 但未通过 10d 观察期	90	900	9000	90000
28d 快速生物降解率 $\geq 20\%$ ， 或固有生物降解率 $\geq 70\%$	300	3000	30000	300000
不降解	1000000			

附录 D 化学物质在 C-STP (O) 中的归趋和暴露估算

D.1 C-STP (O) 模型简介

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

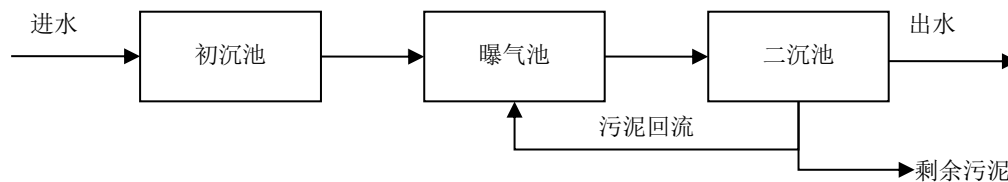


图 D.1 普通活性污泥法工艺流程

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

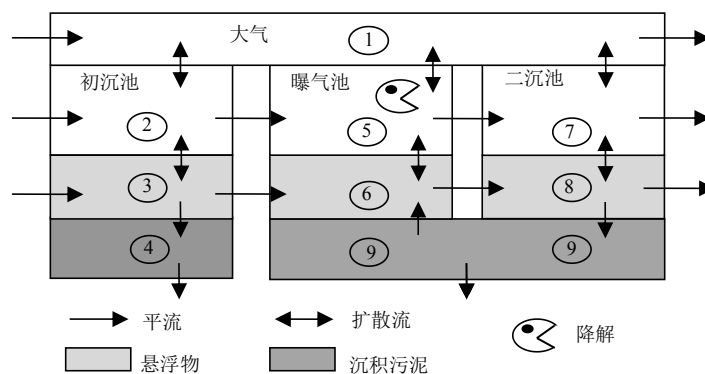


图 D.2 C-STP (O) 化学物质暴露评估概念模型

概念模型按照O型工艺流程, 将各池体拆分为为大气、水相、悬浮物相、沉积污泥相。图D.2中单向箭头表示从i箱到j箱的平流过程, 包括水、水中悬浮物、大气的流动以及初沉池和二沉池污泥的去除, 平流过程不可逆; 双向箭头代表相邻介质i和j间的扩散, 由介质i和j

的非稳态浓度驱动，包括吸附和挥发；假定降解过程主要发生在曝气池。

综上，概念模型由9相、15个平流过程、6个扩散过程和1个降解过程组成。

D.2 模型主要计算过程

D.2.1 质量守恒方程

稳态条件下，各箱质量守恒方程见公式 (D-1)。

$$-k_i c_i V_i + \sum [A(i,j) \times c_i] + \sum [X(i,j) \times c_i] = 0 \quad (D-1)$$

式中： k_i ——第*i*箱中降解一级动力学常数， s^{-1} 。仅考虑第5箱的降解，数值为 $k_{deg,stp}/3600$ ，

$k_{deg,stp}$ 计算方法见公式 (C-13)；

c_i ——第*i*箱中化学物质浓度， $g \cdot m^{-3}$ ；

V_i ——第*i*箱的体积， m^3 ；

$A(i,j)$ ——环境介质从*i*箱到*j*箱的平流流速， $m^3 \cdot s^{-1}$ ；

$X(i,j)$ ——环境介质从*i*箱到*j*箱的扩散流速， $m^3 \cdot s^{-1}$ 。

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

表 D.1 总质量守恒方程组

输出	输入量(未知)	输入量(已知)
$[A(1,0) + X(1,2) + X(1,5) + X(1,7)] \times c_1$	$-[X(2,1) \times c_2 + X(5,1) \times c_5 + X(7,1) \times c_7]$	=0
$[A(2,5) + X(2,1) + X(2,3)] \times c_2$	$-[X(1,2) \times c_1 + X(3,2) \times c_3]$	= $A(0,2) \times c(0,2)$
$[A(3,6) + A(3,4) + X(3,2)] \times c_3$	$-X(2,3) \times c_2$	= $A(0,3) \times c(0,3)$
$[A(4,0)] \times c_4$	$-A(3,4) \times c_3$	=0
$[A(5,7) + X(5,1) + X(5,6) + k \times V_5] \times c_5$	$-[A(2,5) \times c_2 + X(1,5) \times c_1 + X(6,5) \times c_6]$	=0
$[A(6,8) + X(6,5)] \times c_6$	$-[A(3,6) \times c_3 + A(9,6) \times c_9 + X(5,6) \times c_5]$	=0
$[A(7,0) + X(7,1) + X(7,8)] \times c_7$	$-[A(5,7) \times c_5 + X(1,7) \times c_1 + X(8,7) \times c_8]$	=0
$[A(8,0) + A(8,9) + X(8,7)] \times c_8$	$-[A(6,8) \times c_6 + X(7,8) \times c_7]$	=0
$[A(9,0) + A(9,6)] \times c_9$	$-[A(8,9) \times c_8]$	=0

注： $c(0,2)$ 为STP进水中化学物质溶解态浓度， $g \cdot m^{-3}$ ； $c(0,3)$ 为STP进水中化学物质吸附态浓度， $g \cdot m^{-3}$ 。

D.2.2 容积参数

各池体积 ($Volume_n$)、面积 ($Area_n$) 以及STP总面积 ($Area_{stp}$) 计算方法：

$$Volume_n = EFFLUENT_{stp} \times HRT_n / 24 \quad (D-2)$$

$$Area_n = Volume_n / Depth_n \quad (D-3)$$

$$Area_{stp} = \sum Area_n \quad (D-4)$$

式中： $Volume_n$ ——*n*池（初沉池、曝气池、二沉池）体积， m^3 ；

$EFFLUENT_{stp}$ ——污水日处理量, $m^3 \cdot d^{-1}$ 。推荐值见表 B.1;

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

$Area_n$ ——n 池 (初沉池、曝气池、二沉池) 表面积, m^2 ;

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

$Area_{stp}$ ——STP 总面积, m^2 。

根据计算得到的各池体积和面积, 进一步计算各箱体积 (V_i):

$$V_1 = Area_{stp} \times h_{air} \quad (D-5)$$

$$V_2 = Volume_{PS} \quad (D-6)$$

$$V_5 = Volume_O \quad (D-7)$$

$$V_7 = Volume_{SLS} \quad (D-8)$$

$$V_3 = V_2 \times 1/3 \times SS_{PS} / (\rho_{PS} \times 1000) \quad (D-9)$$

$$V_6 = V_5 \times MLSS_O / (\rho_O \times 1000) \quad (D-10)$$

$$V_8 = V_7 \times SS_{SLS} / (\rho_{SLS} \times 1000) \quad (D-11)$$

$$V_4 = Area_{PS} \times 0.1 \quad (D-12)$$

$$V_9 = Area_{SLS} \times 0.1 \quad (D-13)$$

式中: V_i ——各箱体积, m;

h_{air} ——STP 上方大气高度, m。默认为 10;

SS_{PS} 、 $MLSS_O$ 、 SS_{SLS} ——分别为初沉池、曝气池和二沉池悬浮物浓度, $kg \cdot m^{-3}$ 。推荐值见表 B.1;

ρ_{PS} 、 ρ_O 、 ρ_{SLS} ——分别为进水、曝气池和二沉池中悬浮物或污泥密度, $kg \cdot L^{-3}$ 。推荐值见表 B.1。

D.2.3 平流

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

$$A(0,1) = A(1,0) = \sqrt{Area_{stp}} \times h_{air} \times WINDspeed \quad (D-14)$$

$$A(0,2) = A(2,5) = A(5,7) = EFFLUENT_{stp} / (24 \times 3600) \quad (D-15)$$

$$A(0,3) = A(0,2) \times \frac{SS_{RS}}{\rho_{RS} \times 1000} \quad (D-16)$$

$$A(3,6) = A(0,3) \quad (D-17)$$

$$A(3,4) = A(4,0) = 2/3 \times A(0,3) \quad (D-18)$$

$$A(8,9) = A(6,8) - A(8,0) \quad (D-19)$$

$$A(9,6) = A(8,9) - A(9,0) \quad (D-20)$$

$$A(9,0) = \frac{S_{\text{sludge}}}{24 \times 3600 \times 1000 \times \rho_{\text{SLS}}} \quad (D-21)$$

式中: $A(i,j)$ ——环境介质从 i 箱到 j 箱的平流流速, $\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$;

$Area_{\text{stp}}$ ——STP 总面积, m^2 。计算方法见 (D-4);

h_{air} ——STP 上方大气高度, m 。默认为 10;

$WINDspeed$ ——风速, $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ 。推荐值见表 B.1;

$EFFLUENT_{\text{stp}}$ ——污水日处理量, $\text{m}^3 \cdot \text{d}^{-1}$ 。推荐值见表 B.1;

SS_{RS} ——原水中悬浮物浓度, $\text{mg} \cdot \text{L}^{-1}$ 。推荐值见表 B.1;

ρ_{RS} 、 ρ_{SLS} ——分别为进水和二沉池中悬浮物密度, $\text{kg} \cdot \text{L}^{-3}$ 。推荐值见表 B.1;

S_{sludge} ——每日产生的剩余污泥量, $\text{kg} \cdot \text{d}^{-1}$ 。计算方法见 (D-22)。

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

$$S_{\text{sludge}} = P_{\text{sludge}} + 1000 \cdot 3600 \cdot 24 \cdot [A(3,4) \times \rho_{\text{PS}} + A(3,6) \times \rho_{\text{PS}} - A(8,0) \times \rho_{\text{SLS}}] \quad (D-22)$$

$$P_{\text{sludge}} = EFFLUENT_{\text{stp}} \times BOD_{\text{RS}}(1 - F_{\text{BOD.PS}}) \times F_{\text{BOD.O}} \times Y_{\text{sludge}} \quad (D-23)$$

$$Y_{\text{sludge}} = 0.947 + 0.0739 \times \ln k_{\text{SLR}} \quad (D-24)$$

式中: S_{sludge} ——每日产生的剩余污泥量, $\text{kg} \cdot \text{d}^{-1}$;

P_{sludge} ——曝气池每日污泥产生量, $\text{kg} \cdot \text{d}^{-1}$;

$A(i,j)$ ——环境介质从 i 箱到 j 箱的平流流速, $\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$;

ρ_{PS} 、 ρ_{SLS} ——分别为初沉池、二沉池悬浮物密度, $\text{kg} \cdot \text{L}^{-3}$ 。推荐值见表 B.1;

$EFFLUENT_{\text{stp}}$ ——污水日处理量, $\text{m}^3 \cdot \text{d}^{-1}$ 。推荐值见表 B.1;

BOD_{RS} ——进水 BOD_5 , $\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$ 。推荐值见表 B.1;

$F_{\text{BOD.PS}}$ 、 $F_{\text{BOD.O}}$ ——分别为初沉池和曝气池的 BOD_5 去除率, 无量纲。默认 $F_{\text{BOD.PS}}$ 为 36%, $F_{\text{BOD.O}}$ 为 90%;

Y_{sludge} ——污泥产率, $\text{kg} \cdot \text{kg}^{-1}$;

k_{SLR} ——污泥负荷, $\text{kg} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。默认为 0.14。

D.2.4 扩散

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

$$X(i,j) = D(i,j)/Z_i \quad (D-25)$$

式中: $D(i,j)$ —— i 箱到 j 箱的迁移系数, $\text{mol} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{Pa}^{-1}$ 。吸附 D 值计算方法见公式 (D-26),

初沉池和二沉池的挥发 D 值计算方法见公式 (D-27), 曝气池的挥发 D 值计

算方法见公式 (D-28);

Z_i ——i 箱的逸度容量, $\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{Pa}^{-1}$ 。计算方法分别见公式 (D-29)、(D-30)和 (D-31)。

$$D(i,j) = D(j,i) = \frac{k_{\text{abs}}}{1/(V_i \times Z_i) + 1/(V_j \times Z_j)} \quad (\text{D-26})$$

$$D(i,j) = D(j,i) = \frac{\text{Area}_n}{\frac{1}{K_{\text{air}} \times Z_i} + \frac{1}{K_{\text{water}} \times Z_j}} \quad (\text{D-27})$$

$$D(1,5) = D(5,1) = \frac{k_{\text{aerator}}}{\frac{1}{V_1 \times f_{\text{aera.O}} \times Z_1} + \frac{1}{V_5 \times Z_5}} \quad (\text{D-28})$$

$$Z_3 = Z_6 = Z_8 = Z_9 = K p_n \times \rho_n / \text{HENRY} \quad (\text{D-29})$$

$$Z_2 = Z_5 = Z_7 = 1 / \text{HENRY} \quad (\text{D-30})$$

$$Z_1 = 1 / [R \times (273 + T_{\text{env}})] \quad (\text{D-31})$$

式中: k_{abs} ——污泥吸附速率常数, s^{-1} 。曝气池为 $\ln 2/360$, 初沉池和二沉池为 $\ln 2/3600$;

V_i ——水相和污泥相体积, m^3 。计算方法见公式 (D-5) 至 (D-13);

Area_n ——对应 n 池的面积, m^2 。计算方法见 (D-3);

K_{air} ——大气传质系数, $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ 。默认为 2.78×10^{-3} ;

K_{water} ——水传质系数, $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ 。默认为 2.78×10^{-5} ;

k_{aerator} ——曝气池挥发速率常数, s^{-1} 。为表面挥发速率常数(k_{surf})和曝气挥发速率常数(k_{strip})之和;

$f_{\text{area.O}}$ ——曝气池占有所有池体的面积比例, 无量纲;

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

ρ_n ——对应 n 池(初沉池、曝气池和二沉池)中污泥密度, $\text{kg}\cdot\text{L}^{-3}$ 。推荐值见表 B.1;

HENRY ——化学物质亨利常数, $\text{Pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$ 。计算方法见 (C-4);

R ——气体常数, $8.314 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$;

T_{env} ——环境温度, $^{\circ}\text{C}$ 。推荐取值见表 B.1。

D.2.5 降解

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

D.2.6 化学物质输入量计算

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

$$c(0,2) = 1000 \times E_{\text{water.L}} / \text{EFFLUENT}_{\text{stp}} \times f_{\text{dis}} \quad (\text{D-32})$$

$$c(0,3) = c(0,2) \times K p_{\text{RS}} \quad (\text{D-33})$$

$$f_{\text{dis}} = 1 / (1 + K p_{\text{RS}} \times \text{SS}_{\text{RS}} / 1000) \quad (\text{D-34})$$

式中: $c(0,2)$ 、 $c(0,3)$ ——分别为进水中化学物质溶解态和吸附态浓度, $\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$;

$E_{\text{water.L}}$ ——向 STP 废水中化学物质日排放率, $\text{kg}\cdot\text{d}^{-1}$ 。计算方法见第 9 章节;

$EFFLUENT_{\text{stp}}$ ——污水日处理量, $\text{m}^3\cdot\text{d}^{-1}$ 。推荐值见表 B.1;

f_{dis} ——进水中溶解态的化学物质比例, 无量纲;

K_{PRS} ——原水中悬浮物固-水分配系数, $\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$ 。计算方法见公式 (C-8);

SS_{RS} ——进水中悬浮物浓度, $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ 。推荐值见表 B.1。

D.2.7 质量守恒方程求解

根据公式求解质量守恒方程, 得到各箱体浓度矩阵 C :

$$C=G^{-1}\times N \quad (\text{D-35})$$

式中: C ——质量守恒方程中浓度矩阵, $\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$;

G ——质量守恒方程中环境介质的流量矩阵, $\text{m}^3\cdot\text{s}^{-1}$;

N ——质量守恒方程中常数矩阵, $\text{g}\cdot\text{s}^{-3}$ 。

D.2.8 排放系数和各介质浓度计算

STP 向二级出水排放系数 ($F_{\text{stp.water}}$)、大气排放系数 ($F_{\text{stp.air}}$) 和污泥的排放系数 ($F_{\text{stp.sludge}}$) 计算方法分别见公式 (D-36)、(D-37) 和 (D-38), 污泥中化学物质浓度 (C_{sludge}) 和 STP 出水中化学物质浓度 (PEC_{stp}) 计算方法分别见公式 (D-39) 和 (D-40):

$$F_{\text{stp.water}} = \frac{c_7 \times A(7,0) + c_8 \times A(8,0)}{E_{\text{water.L}} \times \frac{1000}{3600 \times 24}} \times 100 \quad (\text{D-36})$$

$$F_{\text{stp.air}} = \frac{c_1 \times A(1,0)}{E_{\text{water.L}} \times \frac{1000}{3600 \times 24}} \times 100 \quad (\text{D-37})$$

$$F_{\text{stp.sludge}} = \frac{c_4 \times A(4,0) + c_9 \times A(9,0)}{E_{\text{water.L}} \times \frac{1000}{3600 \times 24}} \times 100 \quad (\text{D-38})$$

$$C_{\text{sludge}} = \frac{F_{\text{stp.sludge}} \times E_{\text{water.L}} \times 10^6}{P_{\text{sludge}}} \quad (\text{D-39})$$

$$PEC_{\text{stp}} = \frac{E_{\text{water.L}} \times F_{\text{stp.water}} \times 10^6}{EFFLUENT_{\text{stp}}} \quad (\text{D-40})$$

式中: $F_{\text{stp.water}}$ 、 $F_{\text{stp.air}}$ 和 $F_{\text{stp.sludge}}$ ——分别为 STP 向水、气和污泥的排放系数, 无量纲;

c_i ——第 i 箱中化学物质浓度, $\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ 。计算方法见公式 (D-35);

$A(i,j)$ ——环境介质从 i 箱到 j 箱的平流流量, $\text{m}^3\cdot\text{s}^{-1}$ 。计算方法见公式 (D-14) 至 (D-21);

$E_{\text{water.L}}$ ——排入 STP 的废水中化学物质日排放量, $\text{kg}\cdot\text{d}^{-1}$ 。计算方法见第 9 章节;

PEC_{stp} ——STP 曝气池暴露浓度 (等于出水中化学物质浓度), $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$;

C_{sludge} ——污泥中化学物质浓度, $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$;

P_{sludge} ——污泥产生率, $\text{kg}\cdot\text{d}^{-1}$ 。计算方法见公式 (D-23);

$EFFLUENT_{\text{stp}}$ ——污水日处理量, $\text{m}^3\cdot\text{d}^{-1}$ 。推荐值见表 B.1。

附录 E 局部尺度环境暴露估算模型

E.1 大气

(1) 局部大气 STP 间接排放率 ($E_{\text{stp.air}}$):

$$E_{\text{stp.air}} = F_{\text{stp.air}} \cdot E_{\text{water.L}} \quad (\text{E-1})$$

式中: $E_{\text{stp.air}}$ ——集中式 STP 向局部大气的排放量, $\text{kg} \cdot \text{d}^{-1}$;

$F_{\text{stp.air}}$ ——集中式 STP 大气排放系数, 无量纲。计算方法见公式 (D-37);

$E_{\text{water.L}}$ ——局部废水排放率, $\text{kg} \cdot \text{d}^{-1}$ 。

(2) 大气中年均浓度 ($PEC_{\text{air,ann.L}}$):

$$PEC_{\text{air,ann.L}} = \max(E_{\text{air.L}}, E_{\text{stp.air}}) \times C_{\text{std.air}} \times \frac{T_{\text{emission}}}{365} + PEC_{\text{air.R}} \quad (\text{E-2})$$

式中: $PEC_{\text{air,ann.L}}$ ——大气中局部年均预测环境浓度, $\text{mg} \cdot \text{m}^{-3}$;

$E_{\text{air.L}}$ ——局部大气直接排放率, $\text{kg} \cdot \text{d}^{-1}$;

$E_{\text{stp.air}}$ ——局部大气集中式 STP 间接排放率, $\text{kg} \cdot \text{d}^{-1}$ 。计算方法见公式 (E-1);

$C_{\text{std.air}}$ ——排放量为 $1 \text{ kg} \cdot \text{d}^{-1}$ 时大气中的浓度, $\text{mg} \cdot \text{m}^{-3}$ 。默认为 2.78×10^{-4} ;

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

$PEC_{\text{air.R}}$ ——区域大气预测环境浓度, $\text{mg} \cdot \text{m}^{-3}$ 。

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

$$DEP_{\text{total}} = (E_{\text{air.L}} + E_{\text{stp.air}}) \times (F_{\text{ass.aer}} \times DEP_{\text{std.aer}} + (1 - F_{\text{ass.aer}}) \times DEP_{\text{std.gas}}) \quad (\text{E-3})$$

$$DEP_{\text{total,ann}} = DEP_{\text{total}} \times \frac{T_{\text{emission}}}{365} \quad (\text{E-4})$$

式中: DEP_{total} ——大气总沉降通量, $\text{mg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{d}^{-1}$;

$E_{\text{air.L}}$ ——局部大气直接排放率, $\text{kg} \cdot \text{d}^{-1}$;

$E_{\text{stp.air}}$ ——局部大气集中式 STP 间接排放率, $\text{kg} \cdot \text{d}^{-1}$ 。计算方法见公式 (E-1);

$F_{\text{ass.aer}}$ ——物质与气溶胶结合的比率, 无量纲。计算方法见公式 (C-6);

$DEP_{\text{std.aer}}$ ——排放量 $1 \text{ kg} \cdot \text{d}^{-1}$ 时气溶胶结合化学物质标准沉降通量, $\text{mg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{d}^{-1}$ 。默认为 0.01;

$DEP_{\text{std.gas}}$ ——气态化学物质沉降通量, $\text{mg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{d}^{-1}$ 。默认化学物质 $\lg HENRY \leq -2$ 时为 5×10^{-4} , $-2 < \lg HENRY \leq 2$ 时为 4×10^{-4} , $2 < \lg HENRY$ 时为 3×10^{-4} ;

$DEP_{\text{total,ann}}$ ——大气年均总沉降通量, $\text{mg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{d}^{-1}$;

T_{emission} ——排放天数, $\text{d} \cdot \text{y}^{-1}$ 。

E.2 地表水

(1) 地表水局部预测环境浓度 ($PEC_{\text{water.L}}$) 应根据直排和集中式 STP 间接排放的实际排放情况, 按照公式 (E-5) 计算:

$$PEC_{\text{water.L}} = C_{\text{water.L}} + C_{\text{directwater.L}} + PEC_{\text{water.R}} \quad (\text{E-5})$$

$$C_{\text{water.L}} = \frac{PEC_{\text{stp}}}{(1 + Kp_{\text{susp}} \times SUSP_{\text{water}} \times 10^{-6}) \times DILUTION} \quad (\text{E-6})$$

$$C_{\text{directwater.L}} = \frac{E_{\text{directwater.L}} \times 1000}{(1 + Kp_{\text{susp}} \times SUSP_{\text{water}} \times 10^{-6}) \times FLOW} \quad (\text{E-7})$$

$$DILUTION = \frac{EFFLUENT_{\text{stp}} + FLOW}{EFFLUENT_{\text{stp}}} \quad (\text{E-8})$$

式中： $PEC_{\text{water.L}}$ ——地表水局部预测环境浓度， $\text{mg} \cdot \text{L}^{-1}$ ；

$C_{\text{water.L}}$ ——集中式 STP 排放的地表水浓度， $\text{mg} \cdot \text{L}^{-1}$ 。计算方法见公式 (E-6)；

$C_{\text{directwater.L}}$ ——直接排放的地表水浓度， $\text{mg} \cdot \text{L}^{-1}$ 。计算方法见公式 (E-7)；

$PEC_{\text{water.R}}$ ——地表水区域预测环境浓度， $\text{mg} \cdot \text{L}^{-1}$ ；

PEC_{stp} ——集中式 STP 出水浓度， $\text{mg} \cdot \text{L}^{-1}$ 。计算方法见公式 (D-40)；

Kp_{susp} ——悬浮物的固-水分配系数， $\text{L} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。计算方法见公式 (C-8)；

$SUSP_{\text{water}}$ ——河流中悬浮物的浓度， $\text{mg} \cdot \text{L}^{-1}$ 。推荐值见表 B.2；

$DILUTION$ ——稀释倍数，无量纲。计算方法见公式 (E-8)；

$E_{\text{directwater.L}}$ ——局部直排地表水的排放率， $\text{kg} \cdot \text{d}^{-1}$ 。计算方法见公式 3；

$EFFLUENT_{\text{stp}}$ ——污水处理厂出水量， $\text{m}^3 \cdot \text{d}^{-1}$ 。推荐值见表 B.1；

$FLOW$ ——受纳河流流量， $\text{m}^3 \cdot \text{d}^{-1}$ 。推荐值见表 B.2。

(2) 地表水年均局部预测环境浓度 ($PEC_{\text{water.ann.L}}$):

$$PEC_{\text{water.ann.L}} = PEC_{\text{water.L}} \times \frac{T_{\text{emission}}}{365} \quad (\text{E-9})$$

式中： $PEC_{\text{water.ann.L}}$ ——地表水年均局部预测环境浓度， $\text{mg} \cdot \text{L}^{-1}$ ；

$PEC_{\text{water.L}}$ ——地表水局部预测环境浓度， $\text{mg} \cdot \text{L}^{-1}$ 。计算方法见公式 (E-5)；

T_{emission} ——排放时间， $\text{d} \cdot \text{y}^{-1}$ 。

E.3 沉积物

沉积物中化学物质局部预测环境浓度 ($PEC_{\text{sed.L}}$) 计算方法见公式 (E-10):

$$PEC_{\text{sed.L}} = \frac{K_{\text{susp-water}}}{\rho_{\text{susp}}} \times PEC_{\text{water.L}} \times 1000 \times CONV_{\text{sed}} \quad (\text{E-10})$$

$$CONV_{\text{sed}} = \frac{\rho_{\text{sed}}}{F_{\text{solid.sed}} \times \rho_{\text{solid}}} \quad (\text{E-11})$$

式中： $PEC_{\text{sed.L}}$ ——沉积物中化学物质局部预测环境浓度， $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$ ；

$K_{\text{susp-water}}$ ——水中悬浮物-水分配系数， $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-3}$ 。计算方法见公式 (C-9)；

$PEC_{\text{water.L}}$ ——地表水化学物质局部预测环境浓度， $\text{mg} \cdot \text{L}^{-1}$ 。计算方法见公式 (E-5)；

$CONV_{\text{sed}}$ ——沉积物湿重-干重转化系数， $\text{kg}_{\text{dwt}} \cdot \text{kg}_{\text{wwt}}^{-1}$ 。计算方法见公式 (E-11)；

ρ_{susp} ——水中悬浮物密度 (以湿重计)， $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ 。计算方法见公式 (C-3)；

$F_{\text{solid.sed}}$ ——沉积物中固体的体积分数， $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-3}$ 。推荐值见表 B.2；

ρ_{sed} ——沉积物密度， $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ 。计算方法见公式 (C-3)；

ρ_{soil} ——固体密度， $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ 。推荐值见表 B.2。

E.4 土壤

E.4.1 土壤中化学物质大气日沉降通量

土壤中化学物质大气日沉降通量 (D_{air}):

$$D_{\text{air}} = \frac{DEP_{\text{total,ann}}}{DEPTH_{\text{soil}} \times \rho_{\text{soil}}} \quad (\text{E-12})$$

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

$DEP_{\text{total,ann}}$ ——大气中化学物质年均沉降通量， $\text{mg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{d}^{-1}$ 。计算方法见公式 (E-4);

$DEPTH_{\text{soil}}$ ——土壤混合层深度，m。推荐值见表 B.2;

ρ_{soil} ——土壤密度， $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ 。计算方法见公式 (C-3)。

E.4.2 土壤中化学物质的去除

(1) 土壤中化学物质总去除一级反应速率常数 (k_{soil}):

$$k_{\text{soil}} = k_{\text{volat}} + k_{\text{leach}} + k_{\text{bio,soil}} \quad (\text{E-13})$$

式中: k_{soil} ——土壤中化学物质去除的总一级反应速率常数， d^{-1} ;

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

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

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

(2) 土壤中化学物质挥发的准一级反应速率常数 (k_{volat}):

$$k_{\text{volat}} = \frac{1}{\left(\frac{K_{\text{soil-water}}}{k_{\text{asl,air}} \cdot K_{\text{air-water}}} + \frac{1}{k_{\text{asl,soil}}}\right) \cdot DEPTH_{\text{soil}}} \times Corr_{\text{volat,s}} \quad (\text{E-14})$$

$$k_{\text{asl,soil}} = 0.1 \cdot k_{\text{bio,soil}} \quad (\text{E-15})$$

$$Corr_{\text{volat,s}} = \frac{\frac{1}{0.1} DEPTH_{\text{soil}}}{1 - e^{-\frac{1}{0.1} DEPTH_{\text{soil}}}} \quad (\text{E-16})$$

式中: k_{volat} ——土壤中化学物质的准一级挥发速率常数， d^{-1} ;

$Corr_{\text{volat,s}}$ ——土壤挥发速率常数深度校正因子，无量纲;

$K_{\text{soil-water}}$ ——土壤-水分配系数， $\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$ 。计算方法见公式 (C-9);

$DEPTH_{\text{soil}}$ ——土壤的混合层深度，m。推荐值见表 B.2;

$k_{\text{asl,air}}$ ——大气-土壤界面气相传质系数， $90.5 \text{ m}\cdot\text{d}^{-1}$;

$k_{\text{asl,soil}}$ ——大气-土壤界面土壤传质系数， $\text{m}\cdot\text{d}^{-1}$;

$K_{\text{air-water}}$ ——气-水分配系数， $\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$ 。计算方法见公式 (C-5);

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

(3) 顶层土壤化学物质淋溶的准一级反应速率常数 (k_{leach}):

$$k_{\text{leach}} = \frac{Finf_{\text{soil}} \times RAINrate \times 365/100}{K_{\text{soil-water}} \times DEPTH_{\text{soil}}} \quad (\text{E-17})$$

式中: k_{leach} ——土壤中化学物质淋溶的准一级反应速率常数, d^{-1} ;

$F_{infsoil}$ ——渗透进入土壤的雨水比例, 无量纲。默认为 0.25;

$RAINrate$ ——降水速率, $mm \cdot y^{-1}$ 。推荐值见表 B.2;

$K_{soil-water}$ ——土壤-水分配系数, $m^3 \cdot m^{-3}$ 。计算方法见公式 (C-9);

$DEPTH_{soil}$ ——土壤的混合深度, m 。推荐值见表 B.2。

E.4.3 土壤中化学物质浓度的计算

(1) 大气沉降持续 5 年后 0 时刻土壤中化学物质的浓度 ($C_{dep.soil5}(0)$):

$$C_{dep.soil5}(0) = \frac{D_{air}}{k_{soil}} \cdot (1 - e^{-365 \cdot 5 \cdot k_{soil}}) \quad (E-18)$$

式中: $C_{dep.soil5}(0)$ ——大气沉降持续 5 年后 0 时刻, 土壤中化学物质的浓度, $mg \cdot kg^{-1}$;

D_{air} ——每千克土壤中化学物质大气日沉降通量, $mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$ 。计算方法见公式 (E-12);

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

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

$$C_{sludge.soil1}(0) = \frac{C_{sludge} \cdot APPL_{sludge}}{DEPTH_{soil} \cdot \rho_{soil}} \quad (E-19)$$

式中: $C_{sludge.soil1}(0)$ ——污泥施用 1 年后 0 时刻, 土壤中化学物质的浓度, $mg \cdot kg^{-1}$;

C_{sludge} ——污泥中化学物质浓度, $mg \cdot kg^{-1}$ 。计算方法见公式 (D-39), 或者采用实测数据;

$APPL_{sludge}$ ——污泥的年施用率, $kg \cdot m^{-2} \cdot y^{-1}$ 。推荐值见表 B.2;

$DEPTH_{soil}$ ——土壤的混合层深度, m 。推荐值见表 B.2;

ρ_{soil} ——土壤密度 (以湿重计), $kg \cdot m^{-3}$ 。计算方法见公式 (C-3)。

(3) 污泥施用持续 5 年后 0 时刻, 土壤中化学物质的浓度 ($C_{sludge.soil5}(0)$):

$$C_{sludge.soil5}(0) = C_{sludge.soil1}(0) \cdot [1 + \sum_{n=1}^4 Facc^n] \quad (E-20)$$

$$Facc = e^{-365 \times k_{soil}} \quad (E-21)$$

式中: $C_{sludge.soil5}(0)$ ——污泥施用持续 5 年后 0 时刻, 土壤中化学物质的浓度, $mg \cdot kg^{-1}$;

$C_{sludge.soil1}(0)$ ——污泥施用 1 年后 0 时刻, 土壤中化学物质的浓度, $mg \cdot kg^{-1}$ 。计算方法见公式 (E-19);

$Facc$ ——1 年年末化学物质在土壤中累积的比例, 无量纲。计算方法见公式 (E-21);

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

(4) 污泥施用及大气持续沉降 5 年后 0 时刻, 土壤中化学物质的浓度 ($C_{soil5}(0)$):

$$C_{soil5}(0) = C_{dep.soil5}(0) + C_{sludge.soil5}(0) \quad (E-22)$$

式中: $C_{soil5}(0)$ ——污泥施用及大气沉降持续 5 年后 0 时刻, 土壤中化学物质浓度, $mg \cdot kg^{-1}$;

$C_{dep.soil5}(0)$ ——大气沉降持续 5 年后 0 时刻, 土壤中化学物质的浓度, $mg \cdot kg^{-1}$ 。计算方法见公式 (E-18);

$C_{\text{sludge.soil5}}(0)$ ——污泥施用持续 5 年后 0 时刻，土壤中化学物质的浓度， $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ 。计算方法见公式 (E-20)。

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

$$C_{\text{soil.L}}(T) = \frac{D_{\text{air}}}{k_{\text{soil}}} + \frac{1}{k_{\text{soil}} \cdot T} [C_{\text{soil5}}(0) - \frac{D_{\text{air}}}{k_{\text{soil}}}] \cdot [1 - e^{-k_{\text{soil}} \cdot T}] \quad (\text{E-23})$$

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

D_{air} ——土壤的大气日沉降通量， $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$ 。计算方法见公式 (E-12);

T ——时间， d ;

k_{soil} ——土壤中化学物质总去除的一级反应速率常数， d^{-1} 。计算方法见公式 (E-13);

$C_{\text{soil5}}(0)$ ——污泥持续施用 5 年后土壤中化学物质的初始浓度， $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ 。计算方法见 (E-22)。

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

$$PEC_{\text{soil.30.L}} = C_{\text{soil.L}}(30) \times CONV_{\text{soil}} \quad (\text{E-24})$$

$$CONV_{\text{soil}} = \frac{\rho_{\text{soil}}}{F_{\text{solid}} \times \rho_{\text{solid}}} \quad (\text{E-25})$$

式中: $PEC_{\text{soil.30.L}}$ ——土壤中化学物质 30 d 局部预测环境浓度， $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$;

$C_{\text{soil.L}}(30)$ ——污泥施用及大气沉降持续 5 年后，30 d 内土壤中化学物质平均环境浓度， $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ 。计算方法见公式 (E-23);

$CONV_{\text{soil}}$ ——土壤湿重-干重转化系数， $\text{kg}_{\text{dwt}}\cdot\text{kg}_{\text{wwt}}^{-1}$ 。计算方法见公式 (E-25);

ρ_{soil} ——土壤密度， $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ 。计算方法见公式 (C-3);

F_{solid} ——土壤中固体的体积分数， $\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$ 。推荐值见表 B.2;

ρ_{solid} ——固体密度， $\text{kg}_{\text{dwt}}\cdot\text{m}^{-3}$ 。推荐值见表 B.2。

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

$$PEC_{\text{soil.180.L}} = C_{\text{soil.L}}(180) + PEC_{\text{soil.R}} \quad (\text{E-26})$$

式中: $PEC_{\text{soil.180.L}}$ ——土壤中化学物质 180 d 局部预测环境浓度 (以湿重计)， $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$;

$C_{\text{soil.L}}(180)$ ——污泥施用及大气沉降持续 5 年后，180 d 内土壤中化学物质平均环境浓度， $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ 。计算方法见公式 (E-23);

$PEC_{\text{soil.R}}$ ——土壤中化学物质区域预测环境浓度， $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ 。

(8) 土壤孔隙水局部预测环境浓度 ($PEC_{\text{soil.porew.L}}$):

$$PEC_{\text{porew.L}} = \frac{PEC_{\text{soil.180.L}} \times \rho_{\text{soil}}}{K_{\text{soil-water}} \times 1000} \quad (\text{E-27})$$

式中: $PEC_{\text{porew.L}}$ ——土壤孔隙水局部预测环境浓度， $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$;

$PEC_{\text{soil.180.L}}$ ——土壤中化学物质 180 d 局部预测环境浓度（以湿重计）， $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ 。计算方法见公式（E-26）；

ρ_{soil} ——土壤密度（以湿重计）， $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ 。计算方法见公式（C-3）；

$K_{\text{soil-water}}$ ——土壤-水分配系数， $\text{m}^3\cdot\text{m}^{-3}$ 。计算方法见公式（C-9）。

E.5 地下水

地下水中化学物质局部预测环境浓度（ $PEC_{\text{grw.L}}$ ）：

$$PEC_{\text{grw.L}} = PEC_{\text{porew.L}} \quad (\text{E-28})$$

式中： $PEC_{\text{grw.L}}$ ——地下水中化学物质局部预测环境浓度， $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$ ；

$PEC_{\text{porew.L}}$ ——土壤孔隙水局部预测环境浓度， $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$ 。计算方法见公式（E-27）。

E.6 捕食动物

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

E.6.1 水生动物捕食者

水生动物捕食者浓度（ $PEC_{\text{aqu.predator}}$ ）：

$$PEC_{\text{aqu.predator}} = 0.5 \times (PEC_{\text{water.ann.L}} + PEC_{\text{water.R}}) \times BCF_{\text{fish}} \quad (\text{E-29})$$

式中： $PEC_{\text{aqu.predator}}$ ——水生动物捕食者浓度（以湿重计）， $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ ；

$PEC_{\text{water.ann.L}}$ ——地表水年均局部预测环境浓度， $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$ 。计算方法见公式（E-9）；

$PEC_{\text{water.R}}$ ——地表水区域预测环境浓度， $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$ ；

BCF_{fish} ——鱼类生物富集系数（以湿重计）， $\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$ 。

E.6.2 陆生动物捕食者

陆生动物捕食者暴露浓度（ $PEC_{\text{ter.predator}}$ ）：

$$PEC_{\text{ter.predator}} = \frac{BCF_{\text{worm}} \cdot 0.5 \cdot (PEC_{\text{porew.L}} + PEC_{\text{porew.R}}) + 0.5 \cdot (PEC_{\text{soil.180.L}} + PEC_{\text{soil.R}}) \times F_{\text{gut.worm}} \cdot CONV_{\text{soil}}}{1 + F_{\text{gut.worm}} \cdot CONV_{\text{soil}}} \quad (\text{E-30})$$

式中： $PEC_{\text{ter.predator}}$ ——陆生动物捕食者暴露浓度（以湿重计）， $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ ；

BCF_{worm} ——蚯蚓的生物富集系数（以湿重计）， $\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$ 。计算方法见公式（C-10）；

$PEC_{\text{porew.L}}$ ——孔隙水局部预测环境浓度， $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$ 。计算方法见公式（E-27）；

$PEC_{\text{porew.R}}$ ——孔隙水中化学物质区域预测环境浓度， $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$ ；

$PEC_{\text{soil.180.L}}$ ——土壤中化学物质的 180 d 局部预测环境浓度， $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ 。计算方法见公式（E-26）；

$PEC_{\text{soil.R}}$ ——土壤中化学物质区域预测环境浓度， $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ ；

$F_{\text{gut.worm}}$ ——蚯蚓肠道干重占蚯蚓湿重的比例， $\text{kg}_{\text{dwt}} \cdot \text{kg}_{\text{wwt}}^{-1}$ 。默认为 0.1；

$CONV_{\text{soil}}$ ——土壤湿重-干重转化系数， $\text{kg}_{\text{dwt}} \cdot \text{kg}_{\text{wwt}}^{-1}$ 。计算方法见公式（E-25）。

附录 F 局部尺度人体健康暴露估算模型

F.1 吸入途径日均暴露剂量

$$ADD_{inh} = \frac{PEC_{air,L} \times IR_{air} \times ET \times EF \times ED}{BW \times AT} \quad (F-1)$$

式中： ADD_{inh} —局部尺度吸入途径化学物质日均暴露剂量， $mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$ ；

$PEC_{air,L}$ —局部尺度大气化学物质预测环境浓度， $mg \cdot m^{-3}$ 。其值使用 $PEC_{air,ann,L}$ ，计算方法见公式 (E-2)；

IR_{air} —呼吸速率， $m^3 \cdot h^{-1}$ 。推荐值见表 B.3；

ET —每日暴露时长， $h \cdot d^{-1}$ 。推荐值见表 B.3；

EF —暴露频率， $d \cdot y^{-1}$ 。推荐值见表 B.3；

ED —暴露时间， y 。推荐值见表 B.3；

BW —体重， kg 。推荐值见表 B.3；

AT —总暴露天数， d 。推荐值见表 B.3。

F.2 饮用地表水/地下水的日均暴露剂量

$$ADD_{oral,water} = \frac{PEC_{drwl,L} \times IR_{water} \times EF \times ED}{BW \times AT} \quad (F-2)$$

$$PEC_{drwl,L} = \max(PEC_{water,ann,L} \times F_{pur}, PEC_{grw,L}) \quad (F-3)$$

式中： $ADD_{oral,water}$ —局部尺度饮水途径化学物质日均暴露剂量， $mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$ ；

$PEC_{drwl,L}$ —局部尺度饮用水中化学物质浓度， $mg \cdot L^{-1}$ 。取地表水年均局部预测环境浓度（净化后）和地下水中化学物质局部预测环境浓度最大值，计算方法见公式 (F-3)；

IR_{water} —经口饮水摄入率， $L \cdot d^{-1}$ 。推荐值见表 B.3；

$PEC_{water,ann,L}$ —地表水年均局部预测环境浓度， $mg \cdot L^{-1}$ 。计算方法见公式 (E-9)；

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

$PEC_{grw,L}$ —地下水中化学物质局部预测环境浓度， $mg \cdot L^{-1}$ 。计算方法见公式 (E-28)；

EF 、 ED 、 BW 和 AT 含义同公式 (F-1)。

F.3 摄食途径的日均暴露剂量

$$ADD_{oral,food} = \frac{C_{fish,L} \times IR_{fish} \times EF \times ED}{BW \times AT} \quad (F-4)$$

$$C_{fish,L} = PEC_{water,ann,L} \times BCF_{fish} \quad (F-5)$$

式中： $ADD_{oral,food}$ —局部尺度经口摄食途径化学物质日均暴露剂量， $mg \cdot kg^{-1} \cdot d^{-1}$ ；

$C_{fish,L}$ —局部尺度鱼体中化学物质浓度， $mg \cdot kg^{-1}$ 。计算方法见公式 (E-5)；

IR_{fish} ——鱼类摄入量， $\text{kg}\cdot\text{d}^{-1}$ 。推荐值见表 B.3;

$PEC_{\text{water,ann,L}}$ ——地表水年均局部预测环境浓度， $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$ 。计算方法见公式 (E-9);

BCF_{fish} ——鱼类生物富集系数， $\text{L}\cdot\text{kg}_{\text{wet}}^{-1}$;

EF 、 ED 、 BW 和 AT 含义同公式 (F-1)。

F.4 经口摄入土壤的日均暴露剂量

$$ADD_{\text{oral,soil}} = \frac{PEC_{\text{soil,L}} \times IR_{\text{soil}} \times 10^{-6} \times EF \times ED}{BW \times AT} \quad (\text{F-6})$$

式中: $ADD_{\text{oral,soil}}$ ——局部尺度经口摄入土壤中化学物质的日均暴露剂量， $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$;

$PEC_{\text{soil,L}}$ ——局部尺度土壤中化学物质浓度， $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ 。其值使用 $PEC_{\text{soil,180,L}}$ ，计算方法见公式 (E-26);

IR_{soil} ——土壤/尘摄入量， $\text{mg}\cdot\text{d}^{-1}$;

EF 、 ED 、 BW 和 AT 含义同公式 (F-1)。

附录 G 暴露估算工具 (CET)

建议使用 CET 软件估算化学物质 PEC 以及 ADD。

CET 软件采用了本导则规定的估算方法及推荐的暴露参数，包括归趋与分配参数计算、C-STP (O) 模型、局部尺度环境与健康暴露估算模型 (CET-local) 和区域尺度环境暴露估算模型 (CET-regional)。

CET 主要输入参数为化学物质基础信息，所有排放场景的环境排放率。

CET 模型获取来源：<http://ctalab.nies.org/>