

## 환경배출범주/특수환경배출범주 기반 ECETOC TRA 및 주요/산업/용도 분류체계 이용의 K-CHESAR에 의한 환경예측농도 비교 연구

전현표<sup>1,2,3\*</sup> , 양지수<sup>3</sup> , 조하나<sup>3</sup> , 최은경<sup>3</sup> , 김상헌<sup>1,2,3</sup> 

<sup>1</sup>경성대학교 바이오안전학과, <sup>2</sup>경성대학교 화학물질 안전관리 특성화대학원, <sup>3</sup>(주)티세이프지

## A Comparative Study of Predicted Environmental Concentrations from ECETOC TRA Based on Environmental Release Categories/Specific Environmental Release Categories and K-CHESAR Using Main/Industrial/Use Categories

Hyun Pyo Jeon<sup>1,2,3\*</sup>, Jisu Yang<sup>3</sup>, Hana Jo<sup>3</sup>, Eun Kyung Choe<sup>3</sup>, and Sanghun Kim<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Department of Biosafety, Kyungsoong University, <sup>2</sup>Graduate School of Chemical Safety Management Appointed by Ministry of Environment, Kyungsoong University, <sup>3</sup>TSafeG Co., Ltd.

### ABSTRACT

**Background:** Environmental concentrations of substances can be estimated by K-CHESAR based on main, industrial, and use categories (MC/IC/UC) and ECETOC TRA based on environmental or specific environmental categories (ERC or spERC).

**Objectives:** Three different systems for estimating environmental concentrations were compared to figure out their order with possible reasons along with relationship of regional predicted environmental concentrations ( $PEC_{regional}$ ) and final  $PEC_{local}$  for various uses of a substance.

**Methods:** Typical uses of the case substance and their corresponding ERCs were selected from the webpage of the European Chemical Agency. Proper MC/IC/UC and spERC were assigned to each ERC. Emission fractions were compared for each assessment code from the available database. PECs were calculated by three estimating systems: K-CHESAR using MC/IC/UC, ECETOC TRA using ERC, and ECETOC TRA using spERC with their default values for input parameters. Percentage of  $PEC_{regional}$  to  $PEC_{local}$  were manually calculated for each use.

**Results:** Emission factors decreased in the order of ERC > MC/IC/UC > spERC. Values of the final  $PEC_{local}$  derived as sum of  $PEC_{regional}$  and  $C_{local}$  decreased in the order of calculations using ECETOC TRA-ERC>K-CHESAR with MC/IC/UC>ECETOC TRA-spERC for all environmental media. Percentages of  $PEC_{regional,water}$  to  $PEC_{local,water}$  ranged from 0 to 10.3% in industrial uses calculated with MC/IC/UC and ERC but 96.3 to 100% in wide dispersive uses of ERC and spERC where values of  $C_{local,water}$  are estimated to be very low.

**Conclusions:** ECETOC TRA generated the most refined PNEC values with spERC and the least with ERC, while K-CHESAR with MC/IC/UC generated values between the two results. The ratio of  $PEC_{regional}$  to  $PEC_{local}$  can be a good measure for performing suitable estimation of PNECs according to use.

**Key words:** Environmental release category, emission factors, industrial category, predicted environmental concentration, specific environmental release category

Received October 30, 2023

Revised November 10, 2023

Accepted November 20, 2023

### Highlights:

- The final  $PEC_{local}$  decreased in the order of calculations using ECETOC TRA-ERC>K-CHESAR with MC/IC/UC>ECETOC TRA-spERC.
- Percentages of  $PEC_{regional}$  to  $PEC_{local}$  tend to be 0% in industrial uses with MC/IC/UC and ERC.
- Percentages of  $PEC_{regional}$  to  $PEC_{local}$  tend to be close to 100% in wide dispersive uses of ERC and spERC.
- Proper industrial category is not available for professional uses.

### \*Corresponding author:

Department of Biosafety, Kyungsoong University, Suyeong-ro 309, Busan 48434, Republic of Korea  
 Tel: +82-51-663-5694  
 E-mail: hpjeon@ks.ac.kr

## I. 서론

“화학물질의 등록 및 평가 등에 관한 법률” (이하 “화평법”) 이행 과정에서 환경 중 예측농도(predicted environmental concentration, PEC)의 계산은 노출평가 중 환경노출을 위한 사전 단계로서 대상 물질의 취급조건과 위해성관리대책의 결정, 대상물질의 배출량 계산과 배출량에 따른 환경농도 계산으로 이루어진다.<sup>1)</sup> K-CHESAR (Korea CHEMical Safety Assessment and Reporting tool)는 환경 중 예측농도 계산 모형으로서, 한국형 다매체동태모형(SimpleBox\_STP\_Korea)이 탑재되어 있다.<sup>2,3)</sup>

대기, 물, 토양 등과 같은 서로 다른 균일한 모듈 내 및 모듈 간 화학물질의 배출, 이동, 분해 등의 환경 거동을 예측하는 방법은 1980년대 개발되기 시작하였다.<sup>4,5)</sup> SimpleBox는 이러한 다매체동태모형(multimedia mass balance models) 중 하나이며, EUSES (European Union System for the Evaluation of Substances) 내의 regional distribution model에 사용되었고, 유럽 CHESAR 툴의 한 부분을 구성함으로써, 2007년 시행된 유럽 Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (REACH)의 법 이행 체계 내에서 전국(regional) 규모의 환경농도를 예측하는 근간이 되고 있다.<sup>6-9)</sup> 또한, 한국형 인자값을 반영한 SimpleBox Korea를 통해 화평법의 PEC 계산에도 사용되고 있다.<sup>1)</sup>

화학물질의 환경 농도 계산을 통해 환경 노출평가를 수행하는데 자주 사용되는 또 다른 사용자친화적인 툴로서, ECETOC TRA (European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals’ Targeted Risk Assessment)가 있다.<sup>10-14)</sup> 이 툴은 화학물질이 작업자, 소비자 및 환경에 노출되어 야기하는 위해성에 대해 계산하는 Tire I 툴로서, 보수적인 환경배출범주(environmental release category, ERC) 외에 환경 농도의 보정 평가(refined assessment)를 위해 각 산업협회에서 도출한 특수 환경배출범주(Specific ERC, spERC)를<sup>15)</sup> v3 (2012)에서 탑재하여 spERC에 의한 계산 출력이 가능해졌으며, v3.1 (2014년)에서는 추가 개발된 몇 개의 spERC가 업데이트되었다.<sup>12,13)</sup>

EUSES는 EU REACH 및 BPR (Biocidal Products Regulation) 이행 시의 환경 노출평가에 사용하고 CHESAR는 REACH 이행에 사용하며, ECHA에서는 CHESAR와 EUSES를 결합하는 (combine) CHESAR 플랫폼을 개발하고 있으며,<sup>16-19)</sup> 기존에 내재되어 있던 하수처리 모델인 SimpleTreat<sup>18)</sup> v4.0을 추가하였고 CHESAR에도 EUSES 최신 버전이 병합되어 있다.<sup>16,17,19)</sup> CHESAR의 배출 예측(release estimates)은 ERCs, 배출계수(release factor) 혹은 spERCs를 사용할 수 있으며 최신 버전은 vs 3.8 (2023년 6월)이다.<sup>20,21)</sup>

PEC 산출은 Fig. 1에서와 같이 전단계에서 수행되는 배출량 산출 결과가 큰 영향을 미치며 배출량은 용도 패턴(use pattern)

과 관계가 있다.<sup>1,22)</sup> EUSES에서는 주요 분류체계(main category, MC), 산업 분류체계(industrial category, IC) 및 용도 분류체계(use category, UC)를 사용하여 매체별 배출계수를 제시하였고<sup>22,23)</sup> ECETOC에서는 환경배출 시나리오에 따라 총 24개의 ERC를 사용할 수 있고,<sup>1,24)</sup> 13개 산업별로 더 상세하고 산업 특성 정보를 고려하여 생성해 놓은 spERC를 적용할 수 있다.<sup>15,24-28)</sup> AISE (International Association for Soaps, Detergents and Maintenance Products), Cosmetic Europe, CEPE (European Council of the Paint, Printing Ink, and Artist’s Colours Industry) 등 13개 산업별 협회가 개발한 spERC (예로, AISE 18개 spERC, CEPE 29개 등)에 대한 상세 정보는 ecetocTRA-Menv의 release module 및 ERC 시트와<sup>24)</sup> 각 협회별 발간물이나 홈페이지를 참조하면 된다.<sup>29,30)</sup>

본 논문에서는 ERC 1, 2, 5, 6d, 8c를 갖는 사례물질을 Fig. 1의 절차에 따라 MC/IC/UC 분류 및 spERC도 적용하여 같은 용도에 대한 환경배출범주, 특수 환경배출범주 및 산업 분류 체계에 의한 3가지 환경 배출계수를 비교해 보았다. 또한 “환경 중 예측농도”를 구함에 있어 ERC 및 spERC 기반의 ECETOC TRA에 의한 계산 결과와 MC/IC/UC에 의한 K-CHESAR 결과를 비교하면서 특이점과 PEC 결과가 차이가 나는 원인을 파악해 보고자 한다.

## II. 재료 및 방법

### 1. 사용된 계산 프로그램

환경 중 예측농도(PEC) 계산을 위해 화학물질 이행을 위한 위해성자료 작성지원 프로그램인 K-CHESAR 5.0을 한국화학물질관리협회 홈페이지에서 설치형으로 다운받아 사용하

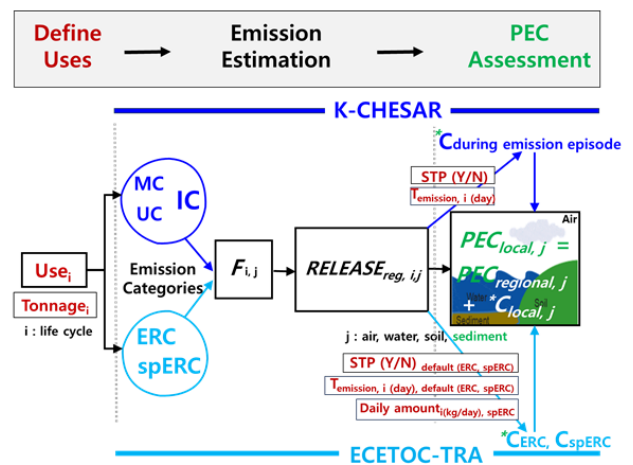


Fig. 1. Workflow to calculate predicted environmental concentrations by K-CHESAR and ECETOC TRA

였다.<sup>2,31)</sup> K-CHE-SAR (Korea CHEMical Safety Assessment and Reporting tool)는 환경 중 예측농도 계산 모형으로서, 화평법에 따라 화학물질의 등록 시 제출해야 하는 위해성자료의 작성을 지원하는 프로그램이며, 현재 2023년 1월 업데이트된 5.0 버전이 사용되고 있다.<sup>2)</sup>

**Table 1.** Minimum substance data collection for operating environmental assessment tools of K-CHE-SAR and ECETOC TRA

Parameter*	Value of physical-chemical properties <sup>20)</sup>
Molecular weight	428 g/mol
LogKow <sup>†</sup>	2.52
Solubility in water	1,200 mg/L at 20°C
Vapor pressure	0.003 Pa at 20°C
Ready biodegradability	Readily biodegradable
Koc <sup>‡</sup>	123.8

\*Substance name: glyceryl propoxy triacrylate, Cas no.: 52408-84-1.

<sup>†</sup>Kow: Octanol/water partition coefficient.

<sup>‡</sup>Koc: Organic carbon normalized adsorption coefficient.

또한, ECETOC 홈페이지를 통해 엑셀 형식의 ECETOC TRA Model v.3.1 통합 툴(integrated tool)을 다운로드 후 설치(압축 풀기 실행)하였다.<sup>24)</sup> 환경 평가 구동에 있어서 Step 1 (identification of substances) 및 Step 2 (physical-chemical properties), Step 3c 환경 평가(environmental assessment)를 사용자 인터페이스(user interface)에 입력을 하여 환경 농도를 산출하였다.

## 2. 물질 선정 및 물리화학적 특성 조사

대상 물질로는 REACH 및 화학물질등록평가법의 물질 등록 대상이고, 생애 단계별로 다양한 용도를 갖는 유기화합물 중에서 선정하였다. 사례 물질로 선정한 glyceryl propoxy triacrylate의 K-CHE-SAR 및 ECETOC TRA (environment) 구동에 필요한 물리적·화학적 특성(분자량, 증기압, 수용해도, 옥탄올/물 분배계수, 생분해성)을 European Chemical Agency (ECHA, 유럽화학물질청)의 공개자료에서 조사하였다(Table 1).<sup>32)</sup>

**Table 2a.** (a) Uses defined and (b) emission fractions for each use according to different category systems of environmental emission  
(a) Uses defined according to different emission category systems

No.	Description of use	Life cycle stage	Main categories/industrial categories/use categories			Environmental release categories/specific ERC	
			MC	IC	UC	ERC	spERC
1	Manufacture of substance	Production*/manufacture <sup>†</sup>	Ib (used in closed systems)	3 (chemical industry: chemicals used in synthesis)	55 (others) not 33	ERC 1 <sup>‡</sup>	Not available
2	Industrial formulation of preparation	Formulation*/formulation <sup>†</sup>	III (non-dispersive use)	14 (paints, lacquers and varnished industry)	52 (viscosity adjustors)	ERC 2 <sup>‡</sup>	CEPE SPERC 2.1c.v1 <sup>§</sup>
3	Industrial use as crosslinking agent in the polymer industry	Processing*/uses at industrial sites <sup>†</sup>	III (non-dispersive use [industrial point sources])	11 (polymers industry)	43 (process regulators)	ERC 6d <sup>‡</sup>	Not available
4	Industrial use in coatings resulting in inclusion into a matrix	Processing*/uses at industrial sites <sup>†</sup>	II (inclusion into or onto a matrix)	14 (paints, lacquers and varnished industry)	52 (viscosity adjustors)	ERC 5 <sup>‡</sup>	CEPE SPERC 5.1a.v1 <sup>§</sup>
5	Professional use in coatings resulting in inclusion into a matrix (roller application or brushing)	Processing*/uses by professional workers <sup>†</sup>	IV (wide dispersive use)	Not available	52 (viscosity adjustors)	ERC 8c <sup>‡</sup>	CEPE SPERC 8c.2a.v1 <sup>§</sup>

\*According to main categories, a proper sub-table of production, formulation or processing can be selected.

<sup>†</sup>According to life cycle description of REACH, manufacture, formulation, uses at industrial sites, uses by professional workers, consumer uses or article service life can be selected.

<sup>‡</sup>ERC 1: Production of chemicals, ERC 2: Formulation of preparations, ERC 6d: Production of resins/rubbers, ERC 5: Industrial use resulting in inclusion into or onto a matrix, ERC 8c: Wide dispersive indoor use resulting in inclusion into or onto a matrix.

<sup>§</sup>CEPE: European Council of the Paint, Printing Ink, and Artists' Colours Industry, CEPE SPERC 2.1c.v1: Formulation of organic solvent borne coating and inks-solids, CEPE SPERC 5.1a.v1: Industrial-spraying-indoor use-solids, CEPE SPERC 8c.2a.v1: Professional-brush/roller-indoor use-solids.

### 3. 사례 물질의 용도 조사 및 용도별 세 가지 분류체계 적용

ECHA 등록 자료로부터 사례 물질의 대표적인 용도 5개를 선정하였고,<sup>33-36)</sup> 용도별 국내 사용 톤 수는 국내 제조량 약 1,200톤(용도 1)에 기반하여 전량 국내 사용 하에 제품으로의 혼합(용도 2) 및 고분자 산업에서의 공정 조절제로의 사용(용도 3)에 동일량 각 600톤씩을 사용한다고 가정하였고, 용도 2에서 만들어진 제품이 산업적 사용(용도 4) 및 전문적 사용(용도 5)에 동일량 각 300톤씩 가정하였다. 조사된 각 용도에 화학물질 배출계수를 구하기 위하여 EU EUSES의 분류체계이면서 K-CHESAR에서 사용하고 있는 MC, IC, UC 번호를 부여하였고,<sup>1,22)</sup> 비교를 위해 ECETOC TRA에서 사용하고 있는 30개의 ERC 코드 중에서 각 용도에 적합한 코드를 부여하였고 적용가능한 spERC 코드를 찾아 함께 부여하였다(Table 2a).<sup>24)</sup> 세 가지 분류체계 및 각 용도에 따라 코드가 부여되면 용도별로 환경매체별 배출계수를 찾아볼 수 있으므로 배출계수 값을 찾아<sup>1,22,24)</sup> 비교를 위해 Table 2b에 별도로 나타내었다.

### 4. K-CHESAR 및 ECETOC TRA 입력 데이터

K-CHESAR 및 ECETOC TRA의 입력 항목 중 물리화학적 성질과 assessment code는 Table 1의 값 및 Table 2의 코드를 입력하였다. K-CHESAR의 용도별 사용 톤 수는 위 II-3에서 논의한 바에 따라 용도 1~용도 5에 각 1,200, 600, 600, 300, 300 톤을 입력하였고 총 사용량은 3,000 톤으로 자동 계산되었다. 아직 한국 버전이 없는 ECETOC TRA는 유럽 버전을 사

용하였으며, 입력 항목 중 “annual EU tonnage”는 ERC 1, 2, 6d, 5, 8c에 각 1,200, 600, 600, 300, 300톤을 입력하였고 톤 수 관련 항목인 “fraction of M/I tonnage to region”은 “annual EU tonnage”의 양을 각 국가(region)에 해당하는 비율이며 보수적으로 ERC 1, 2, 6d, 5에는 자동으로 비율 1을 적용하고, 분산적 사용인 ERC 8c에는 0.1을 디폴트로 적용하게 되어 있다. K-CHESAR를 이용한 PEC 계산 시 조업일수는 ECHA Guidance<sup>9)</sup>의 Table R.16-2에 따른 값을 적용하였으며(Table 3a).<sup>9)</sup> ECETOC TRA를 이용한 PEC 계산의 경우 해당 모델에서는 각 ERC/spERC별로 디폴트값을 자동 적용하는데 조업일수 비교를 위하여 이 값을 찾아<sup>24)</sup> Table 3b에 나타내었다. 하수처리장의 사용 여부(sewage treatment plant, STP: Y or N)는 모두 사용한다고 입력하였다. spERC의 사용자가 현장에 맞도록 설정하여 입력할 수 있는 항목인 하루 사용량(daily amount used at site) 항목은 별도로 입력하지 않았고 MspERC가 자동 계산되어 사용되도록 하였다.

K-CHESAR은 용도 1~용도 5를 한 세트로 구동한 반면, ECETOC TRA는 ERC가 부여된 용도 5개를 첫 세트로 구동하였고, ERC가 부여된 용도 1, 3과 spERC가 부여된 용도 2, 4, 5를 두번째 세트로 구동하였다(Table 4a).

### 5. 사례물질의 매체별 배출계수 확보 및 전국 환경배출량(emission to region) 계산

MC/IC/UC 분류에 따른 배출계수는 EUSES 2.0 문헌<sup>22)</sup>의 A-tables에 실려 있으며, 산업 분류체계(IC)를 중심으로 작성된

**Table 2b.** (a) Uses defined and (b) emission fractions for each use according to different category systems of environmental emission (b) Emission fractions for each use according to different assessment codes

No.	Assessment codes		Emission fractions according to MC/IC/UC*			Emission fractions according to ERC and spERC <sup>†</sup>		
			Air	Water	Soil	Air	Water	Soil
1	MC Ib/IC 3/UC 55	ERC 1	0	0.003	0.0001	0.05	0.06	0.0001
2	MC III/IC 14/UC 52	ERC 2	0.0025	0.02	0.0001	0.025	0.02	0.0001
		CEPE SPERC 2.1c.v1				0.000097	0.00005	0
3	MC III/IC 11/UC 43	ERC 6d	0.075	0.00005	0.00001	0.35	0.00005	0.00025
4	MC II/IC 14/UC 52	ERC 5	0 <sup>‡</sup>	0.01 <sup>‡</sup>	0.005 <sup>‡</sup>	0.5	0.5	0.01
		CEPE SPERC 5.1a.v1				0.02	0	0
5	MC IV/IC 15/0 <sup>§</sup> /UC 52	ERC 8c		Not available <sup>  </sup>		0.15	0.01	0
		CEPE SPERC 8c.2a.v1				0	0.01	0

\*Emission fractions can be selected according to the life cycle stage of production, formulation, industrial use and private use in A-Tables of the corresponding industrial categories, Industrial use in coatings resulting in inclusion into a matrix, Professional use in coatings resulting in inclusion into a matrix.

<sup>†</sup>These default values for ERC and spERC are from the ‘Release module’ sheet in ECETOC TRA (environment) tool.

<sup>‡</sup>Emission factors for solvent-based paints were selected.

<sup>§</sup>Life cycle stage for professional uses is not available in IC 14 as well as the other ICs. Therefore, IC 15/0 with MC IV (wide dispersive uses) was tried according to the reference (p23).<sup>22)</sup>

<sup>||</sup>Emission factor 0 was manually input for all media for K-CHESAR operation.



**Table 3a.** Input parameters in (a) K-CHESAR and (b) ECETOC TRA to calculate regional concentration ( $PEC_{regional}$ ), local concentration ( $C_{local}$ ) and predicted environmental concentration ( $PEC_{local}$ )

(a) Input parameters in K-CHESAR

Use no.*	Assessment codes (release categories)	Tonnage-related			STP <sup>§</sup> (y/n)
		Use volume–regional scale <sup>†</sup> (t/y)	Use volume–local scale (t/y)	Emission days <sup>‡</sup> (d/y)	
1	MC Ib/IC 3/UC 55 <sup>  </sup>	3,000	1,200	100	Yes
2	MC III/IC 14/UC 52	3,000	600	10	Yes
3	MC III/IC 11/UC 43	3,000	600	20	Yes
4	MC II/IC 14/UC 52	3,000	300	20	Yes
5	MC IV/IC 15/0/UC 52	3,000	300	365	Yes

\*Use No.1: Manufacture of substance, Use No.2: Industrial formulation of preparation, Use No.3: Industrial use as crosslinking agent in the polymer industry, Use No.4: Industrial use in coatings resulting in inclusion into a matrix, Use No.5: Professional use in coatings resulting in inclusion into a matrix.

<sup>†</sup>Use volume for regional scale is automatically added up from each local scale use in K-CHESAR.

<sup>‡</sup>Default values are from Table R.16-2 of ECHA Guidance.<sup>9)</sup>

<sup>§</sup>STP: Sewage treatment plant.

<sup>||</sup>MC/IC/UC: Main category/industrial category/use category.

**Table 3b.** Input parameters in (a) K-CHESAR and (b) ECETOC TRA to calculate regional concentration ( $PEC_{regional}$ ), local concentration ( $C_{local}$ ) and predicted environmental concentration ( $PEC_{local}$ )

(b) Input parameters in ECETOC TRA (environmental assessment)

Use no.	Assessment codes (release categories)	Annual EU tonnage* (t/y)	Fraction of tonnage to region*	Daily amount at site for spERC (kg/d) <sup>‡</sup>	Emission days (d/y) <sup>§</sup>	STP (y/n)
1	ERC 1 <sup>¶</sup>	1,200	1.0 <sup>†</sup>	-	20	Yes
2	ERC 2	600	1.0	-	10	Yes
3	ERC 6d	600	1.0	-	20	Yes
4	ERC 5	300	1.0	-	20	Yes
5	ERC 8c	300	0.1 <sup>†</sup>	-	365	Yes
2	CEPE SPERC 2.1c.v1 <sup>**</sup>	600	1.0	Not entered	225	Yes <sup>  </sup>
4	CEPE SPERC 5.1a.v1	300	1.0	Not entered	225	Yes <sup>  </sup>
5	CEPE SPERC 8c.2a.v1	300	0.1	Not entered	225	Yes <sup>  </sup>

\*Terms for these parameters are used without translation in Table 5 because Korean version of ECETOC TRA is not available.

<sup>†</sup>Default setting is applied to ‘fraction of tonnage to region’: for ERCs 1-7 and 12a, 12b=1 and for ERC 8-11b=0.1. The same fraction as ERC’s is applied to the corresponding CEPE SPERC.

<sup>‡</sup>MspERC (kg/d) used if not overwritten in “Daily amount at site for spERC”.

<sup>§</sup>These default values for ERC and spERC are from ‘Release module’ sheet in ECETOC TRA (environment) tool.

<sup>||</sup>Default STP setting is linked to spERC selected.

<sup>¶</sup>ERC: Environmental release categories.

\*\*CEPE SPERC: European Council of the Paint, Printing Ink, and Artists’ Colours Industry/Specific Environmental Release Categories.

표를 시작으로 결정인자를 구분해 가면서 대기, 폐수, 토양의 매체별로 발취할 수 있다. 예로 ERC 1 (화학물질의 제조)에 해당하는 MC Ib/IC 3/UC 55 평가 코드의 경우 IC 3 표들을 먼저 찾고 결정인자인 제조, 혼합, 산업적 사용 중 제조를 선택하면 다음으로 ‘UC≠33 (중간체)’ 혹은 ‘UC=33 (중간체)’을 판단하여 전자에 해당하는 Table A 1.1로 이동하게 되고 여기서 대기 배출계수는 MC Ib 및 결정인자 중 증기압 범위(<1 Pa)에 따

라 0으로 정해진다. 폐수로의 배출계수는 연간 사용량 천 톤이 결정인자가 되어 미만이면 0.02, 이상이면 0.003이 된다. 토양 배출계수는 모든 MC에 결정인자 없이 0.0001이 적용된다. 16 개의 산업 카테고리별 배출계수 표 모음인 A-tables를 검토해보면 IC 코드별로 찾아가서 결정인자인 생애단계별로 개발되어 있는 표를 선택한다. 다음 순서로 드물지만 UC 및 MC 정보가 필요 없을 경우도 있지만 대부분의 경우 UC 및 MC 코드에

**Table 4a.** Environmental concentrations of (a)  $PEC_{regional}$  and (b)  $C_{local}$  and  $PEC_{local}$  generated for environmental media by K-CHESAR and ECETOC TRA (environmental assessment)

(a) Calculation of regional concentrations ( $PEC_{regional}$ )

Tool	Use no.	Assessment code	Regional emissions per use (t/y)			$PEC_{regional}$ (steady-state)				
			Air	Water	Soil	Air (mg/m <sup>3</sup> )	Surface water (mg/L)	Soil (mg/kg)		
								Natural	Agricultural	Industrial
K-CHESAR	1	MC Ib/IC 3/UC 55 <sup>†</sup>	0	3.6	0.12	$5.47 \times 10^{-8}$	$1.05 \times 10^{-4}$	$1.85 \times 10^{-3}$	$7.36 \times 10^{-4}$	$3.02 \times 10^{-3}$
	2	MC III/IC 14/UC 52	1.5	12	0.06					
	3	MC III/IC 11/UC 43	45	0.03	0.006					
	4	MC II/IC 14/UC 52	0	3	15					
	5	MC IV/IC 15/0/UC 52	0	0	0					
	Sum*			46.53	18.63	1.69				
ECETOC TRA (1st set)	1	ERC 1 <sup>‡</sup>	60	72	0.12	$3.75 \times 10^{-6}$	$1.08 \times 10^{-3}$	$1.17 \times 10^{-2}$	$3.46 \times 10^{-3}$	$1.17 \times 10^{-2}$
	2	ERC 2	15	12	0.06					
	3	ERC 6d	210	0.03	0.15					
	4	ERC 5	150	150	3					
	5	ERC 8c	45	3	0					
	Sum*			480	237.03	3.33				
ECETOC TRA (2nd set)	1	ERC 1	60	72	0.12	$2.36 \times 10^{-6}$	$4.31 \times 10^{-4}$	$7.35 \times 10^{-3}$	$2.14 \times 10^{-3}$	$7.35 \times 10^{-3}$
	2	CEPE SPERC 2.1c.v1 <sup>§</sup>	0.0582	0.03	0					
	3	ERC 6d	210	0.03	0.15					
	4	CEPE SPERC 5.1a.v1	6	0	0					
	5	CEPE SPERC 8c.2a.v1	0	3	0					
	Sum*			276.06	75.06	0.27				

\*Sums do not require other user inputs. The sum of all emissions to each medium serves as input for the  $PEC_{regional}$  calculation.<sup>14)</sup>

<sup>†</sup>MC/IC/UC: Main category/industrial category/use category.

<sup>‡</sup>ERC: Environmental release categories.

<sup>§</sup>CEPE SPERC: European Council of the Paint, Printing Ink, and Artists' Colours Industry / Specific Environmental Release Categories.

따라서 배출계수가 정해져 있어 해당 값을 취한다. 매체가 대기 인 경우는 증기압과 끓는점 모두 혹은 각각이 결정인자가 되며 폐수인 경우는 IC에 따라서 수용해도와 화학물질의 각 단계별 취급량 등의 결정인자에 따라 배출계수가 다르게 구성되어져 있는 경우도 있다. 고분자 성형 시 가교제로 사용되는 용도 3은 고분자 중합과 고분자 성형으로 구분되어 있는 IC 11 (고분자 산업) 배출계수 중 후자를 택하고 이 중 가교제가 속하는 UC 43에 의한 배출계수를 사용하였다.

용도별 전국 배출량(regional emission per use)은 더 이상의 다른 입력 변수 없이 배출계수에 연간 사용량을 곱하여 환경매체별로 구한다(배출량=용도별 연간 사용량×배출계수). 국내 사용 톤 수로부터 임의로 가정한 용도별 사용 톤 수가 두 프로 그래프에 모두 동일하게 입력되었고 매체별로 용도별 환경배출량이 총합되어 PEC 산출의 배경 농도로 사용되었다.

**6. 사례물질의 환경매체별 환경 중 예측농도(PEC) 산출**  
 PEC를 산출함에 있어 K-CHESAR 및 ECETOC TRA는 식(1) 및 식(2)를 사용하여 계산한다.<sup>1,3,9,10,14,22)</sup>

$$PEC_{local} = C_{local} + PEC_{regional} \quad (1)$$

$PEC_{local}$ : Predicted environmental concentration (mg/kg)

$C_{local}$ : Local concentration (mg/kg)

$PEC_{regional}$ : Regional concentration (mg/kg)

토양 PEC 계산에는 local scale에 배경 농도로 사용되는 regional scale 농도로 natural soil을 사용한다.<sup>9)</sup>

$$PEC_{local, soil} = C_{local, soil} + PEC_{regional, natural soil} \quad (2)$$

$PEC_{local, soil}$ : Predicted environmental conc. in soil (mg/kg)

$C_{local, soil}$ : Local concentration in soil (mg/kg)  
 $PEC_{regional, natural soil}$ : Regional concentration in natural soil (mg/kg)

K-CHESAR 및 ECETOC TRA에서 사업장 규모 농도( $C_{local}$ )는 배출 에피소드 동안의 농도 계산을 하게 된다. 최종적으로 출력되는  $PEC_{local}$  값은 전국 규모 농도( $PEC_{regional}$ )에 사업장 규모 농도( $C_{local}$ )를 자동 더한 값으로, ECETOC TRA에서는  $PEC_{regional}$ 과  $C_{local}$  값은 최종 출력란에서는 보이지 않으므로 'DATABASE' 시트에서 별도로 두 값을 읽어 Table 4에 나타내었다. 그리고, 매체가 대기일때의  $PEC_{local}(air)$ 를 최종 결과에 출력하지 않아,  $C_{local}(air)+PEC_{regional}(air)$ 를 수기로 별도 계산하여 Table 4에 나타내었다. K-CHESAR에서는  $PEC_{local}$  값,  $PEC_{regional}$  값,  $C_{local}$  값을 출력하나, 메인 인터페이스에는 전자의 두 개값만 제시되므로,  $C_{local}$ 을 알기 위해  $PEC_{local}$  값에서  $PEC_{regional}$  값을 빼는 수기 계산을 하여 Table 4에 같이 나타내었다.

### III. 결 과

#### 1. 조사된 용도에 대한 분류체계 적용 결과

유럽화학물질청에 등록된 사례물질의 대표적인 용도를 생애 주기 순서로 살펴 5개를 선택하여 용도 1~5로 정리한 결과

는 Table 2a와 같다. 자체 물질로 생산되어(용도 1), 페인트 또는 잉크와 같은 산업용 코팅제의 접도를 조정하기 위해 첨가되거나(용도 2) 고분자 산업에서 수지 생산 시 투입되어 다른 원료와 결합하는 중간체로서 사용되며(용도 3), 사례물질이 점도 조절제로 함유된 페인트 또는 잉크와 같은 산업용 코팅제를 산업 현장에서 사용하거나(용도 4) 전문적으로 사용(professional use, 용도 5)하는 것이 흔한 용도이다. ECHA에 보고된 이러한 용도 1~용도 5에 대한 ERC 분류체계는 각 노출시나리오의 노출양상에 적합하게 각 ERC 1, ERC 2, ERC 6d, ERC 5 및 ERC 8c로<sup>33-36)</sup> 무리 없이 적용되었음을 확인할 수 있었고 이 중 4개 용도는 모두 산업적 용도(industrial use)에 해당하며, ERC 8c는 분산적 용도(wide dispersive use)에 해당한다.

페인트, 프린터 잉크, 산업용 코팅 및 예술가용 물감의 제조 및 사용을 대상으로 European Council of the Paint, Printing Ink, and Artist's Colours Industry (CEPE)가 작업해 놓은 특수 환경배출범주(spERC)는 용도 2, 4, 5에만 적용 가능하였다. CEPE의 spERC는 v2가 공개되어 있으나, 본 연구에 사용한 ECETOC TRA v3.1에는 CEPE의 spERC v1만 이용 가능하므로 v1에 의해 분류하였다. ERC 2 (용도 2) 및 ERC 5 (용도 4)에는 각 CEPE SPERC 2.1c.v1, CEPE SPERC 5.1a.v1를 적용하였고 ERC 8C (용도 5)에는 CEPE SPERC 8c.2a.v1

**Table 4b.** Environmental concentrations of (a)  $PEC_{regional}$  and (b)  $C_{local}$  and  $PEC_{local}$  generated for environmental media by K-CHESAR and ECETOC TRA (environmental assessment)  
 (b) Calculation of predicted environmental concentrations ( $PEC_{local}$ )

Use no.	Assessment code	$PEC_{regional}$			$PEC_{local} (=C_{local}+PEC_{regional})$							
		Air (mg/m <sup>3</sup> ) (×10 <sup>-6</sup> )	Water (mg/L) (×10 <sup>-4</sup> )	Soil* (mg/kg) (×10 <sup>-4</sup> )	$C_{local}$		$PEC_{local}$		$C_{local}$		$PEC_{local}$	
					Air (mg/m <sup>3</sup> ) (×10 <sup>-6</sup> )	Fresh water* (mg/L) (×10 <sup>-4</sup> )	Soil <sup>†</sup> (mg/kg) (×10 <sup>-4</sup> )					
1	MC Ib/IC 2/UC 55	0.055	1.05	18.50	0.681 <sup>‡</sup>	0.736	5,918.95	5,920.00	0	18.20		
	ERC 1	3.75	10.80	117	45,698.63	45,702.38 <sup>‡</sup>	45,092.01	45,102.78	125,200	125,317		
2	MC III/IC 14/UC 52	0.055	1.05	18.50	1,329.95 <sup>‡</sup>	1,330.00	19,698.95	19,700.00	160.50	179.00		
	ERC 2	3.75	10.80	117	11,424.66	11,428.41 <sup>‡</sup>	7,515.33	7,526.11	20,881.40	20,998.37		
	CEPE SPERC 2.1c.v1	2.36	4.31	73.50	44.33	46.69 <sup>‡</sup>	8.35	12.66	23.32	96.79		
3	MC III/IC 11/UC 43	0.055	1.05	18.50	39,899.95 <sup>‡</sup>	39,900.00	49.75	50.80	4,821.50	4,840.00		
	ERC 6d	3.75	10.80	117	159,945.21	159,948.96 <sup>‡</sup>	93.94	104.71	875.61	1,347.51		
4	MC II/IC 14/UC 52	0.055	1.05	18.50	0 <sup>‡</sup>	0.055	4,928.95	4,930.00	0	18.50		
	ERC 5	3.75	10.80	117	114,246.58	114,250.33 <sup>‡</sup>	469,708.46	469,719.23	1,302,780	1,302,897		
	CEPE SPERC 5.1a.v1	2.36	4.31	73.50	4,569.86 <sup>‡</sup>	4,572.22 <sup>‡</sup>	0	4.31	17.58	107.69		
5	MC IV/IC 15/0/UC 52	0.055	1.05	18.50	0 <sup>‡</sup>	0.055	0.480	1.53	0	18.50		
	ERC 8c	3.75	10.80	117	0	3.75 <sup>‡</sup>	0.103	10.87	0.29	117.26		
	CEPE SPERC 8c.2a.v1	2.36	4.31	73.50	0	2.36 <sup>‡</sup>	0.167	4.48	0.46	73.93		

\*Regional concentrations (steady-state) in natural soil are used.

<sup>†</sup>Local concentrations in agricultural soil, averaged over 30 days are presented.

<sup>‡</sup>Values were manually calculated according to the Eq.(1) as mentioned in II. Research Methods.

(Professional-brush/roller-indoor use-solids)를 적용할 수 있다.

Table 2의 5가지 용도에 대해 K-CHESAR 구동을 위하여, EU 배출예측방법인 MC/IC/UC의 산업분류체계<sup>1,22)</sup>도 적용하였다. 용도 1은 MC 1b (제조 단계에서 밀폐공정에서 사용), IC 3 (화학 산업: 합성에 사용되는 화학물질), UC 55 (기타)를 부여하였고, ERC 2 (혼합물의 조제)로 분류된 페인트로의 혼합 단계인 용도 2는 MC III (비분산적 사용), IC 14 (페인트, 라커 및 니스(광택) 산업), UC 52 (점성 조절제)를 부여하였고, 용도 1에서 합성된 같은 사례물질이 고분자 합성에서 공정 조절제로 사용된 용도 3에는 MC III (비분산적 사용), IC 11 (폴리머 산업), UC 43 (공정 조절제)을 부여하였다. 용도 4 및 용도 5는 페인트의 산업적 사용 및 전문가 사용인데 모두 페인트를 사용하므로 사례물질의 페인트 내에서의 용도인 UC 52 (점성 조절제)를 부여할 수 있고, 주요 카테고리는 전자는 MC II (제품 내부 또는 표면의 함유물로서 사용), 후자는 MC IV (광범위한 분산적 사용)에 해당한다.

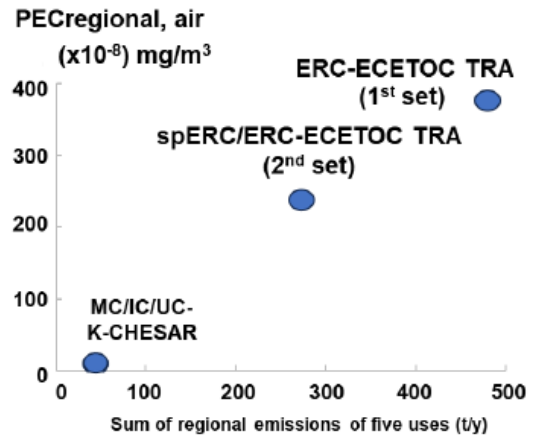
## 2. 사례물질의 전국 환경배출(Emission to region) 예측 결과

사례물질의 5가지 용도에 대해 3가지 다른 시스템에 따라 환경배출 카테고리를 부여했고 이에 따라 배출 계수를 찾아 Table 2b에 정리하였다. ERC 1 (화학물질의 제조)에 해당하는 MC Ib/IC 3/UC 55 평가 코드에 의한 배출계수(대기, 폐수, 토양) 0, 0.003, 0.0001은 ERC 배출계수(대기, 폐수, 토양) 0.05, 0.06, 0.0001과 비교할 때 적은 값이었다. 고분자 성형 시 가교제로 사용되는 용도 3은 고분자 중합과 고분자 성형으로 구분되어 있는 IC 11 (고분자 산업) 배출계수 중 고분자 성형을 택하고 이 중 가교제가 속하는 UC 43에 의한 배출계수인 0.075 (대기), 0.00005 (수), 0.00001 (토양)을 ERC에 의한 배출계수인 0.35 (대기), 0.00005 (수), 0.00001 (토양)과 비교하면 수 및 토양의 배출계수는 같고 대기 배출계수가 약 1/5에 해당한다.

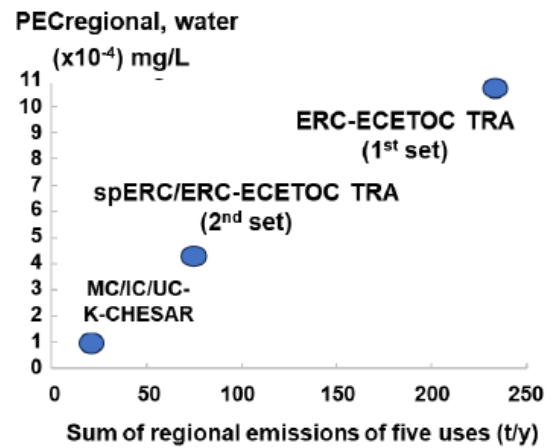
MC/IC/UC에 의한 매체별 배출계수 및 ERC와 spERC에 의한 매체별 배출계수를 비교한 결과, 전반적으로 ERC 분류체계를 이용한 배출량이 가장 크며, spERC 분류체계를 이용한 배출량이 가장 작은 것으로 나타났다(Table 2b). 즉, 용도별로 살펴본 매체별 배출계수 순서는 ERC>MC/IC/UC>spERC임을 알 수 있었다.

이런 절차로 적용된 용도별 배출계수에 용도별 연간 사용량을 곱한 값이 연간 배출량이 되며 이 용도별 연간 배출량 값을 매체별로 총합을 한 값이 Table 4a 및 Fig. 2의 x축에 나타난 전국 규모의 배출량(regional emission per use)이 된다.

### (a) Air



### (b) Water



### (c) Soil

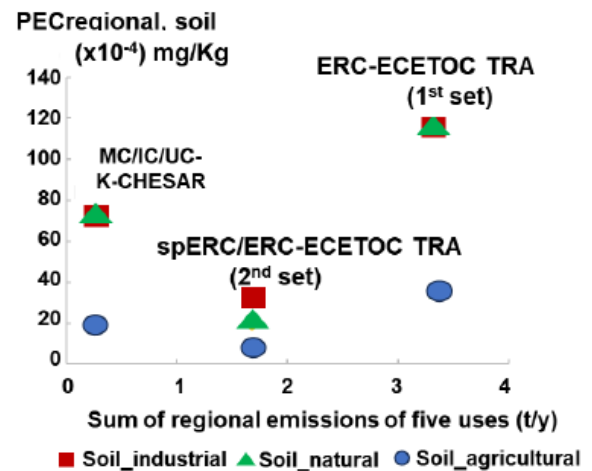


Fig. 2. Plots of steady-state regional concentrations in three different emission categories according to the sum of annual emissions of five uses



### 3. 환경 중 예측 농도(PEC) 산출 결과

용도별 배출량의 총합인 (Table 4a의 sum) 전국 규모 배출량은 정상상태(steady-state)의 전국 환경농도( $PEC_{regional}$ )를 계산하는데 근간이 되고 매체별로 전국 환경농도가 산출되어 출력된다(Table 4a). 세 가지 유형에 따른 평가 코드가 매체별 전국 규모 배출량 총합을 결정 지우며 이 값이 매체별 전국 규모 환경 농도에 영향을 미친다. 전국 규모 환경 농도값은 한 세트로 묶어 구동한 각 용도에 동일한 한 개의 값으로 출력됨을 확인하였고(Table 4a) 이 값이 사업장 규모 농도에 더해져 위성평가에 사용될 최종 PEC를 출력한다(Table 4b).

그러나, 매체별  $PEC_{regional}$ 은 Table 4 및 Fig. 2에서와 같이 ERC (ECETOC 1st set)>spERC (ECETOC 2nd set)>MC/IC/UC (K-CHESAR)로 산출되었는데 이는 2.에서 확인한 5가지 용도별 배출량의 총합의 순서는 매체별 모두 ERC>spERC>MC/IC/UC이며, 배출량 총합에 대해  $PEC_{regional}$  값이 대기 및 수계에서 비례함을 알 수 있었다(Fig. 2a, 2b). 토양 매체에서는 도시산업용지, 자연지, 농경지 순서로  $PEC_{regional}$  값이 감소하였다(Fig. 2c).

K-CHESAR에서 사업장 규모 농도( $C_{local}$ )는 정상상태 분배 모형이 아닌 배출 에피소드 동안의 별도의 방법으로 계산되고<sup>1)</sup> (단, 수계농도는 연간 평균값 적용) ECETOC TRA에서도  $C_{local}$ 은 각 ERC 혹은 spERC 코드에 의한 배출 시나리오(에피소드)에 따라  $C_{local}$ 을 계산한다. K-CHESAR와 ECETOC TRA에서

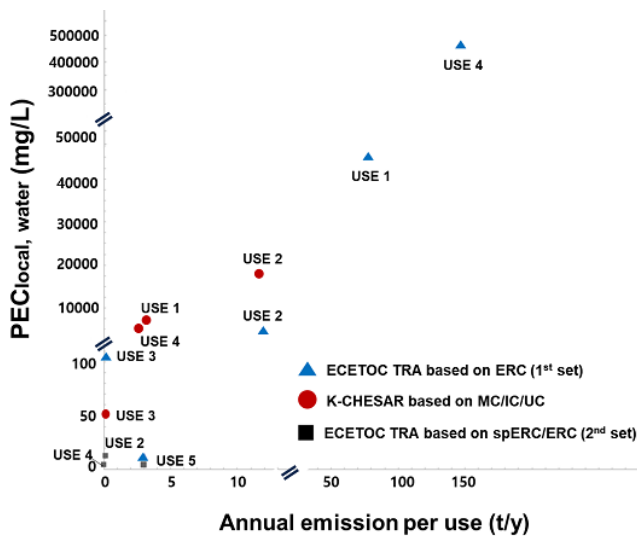


Fig. 3. Plots of predicted local concentrations ( $PEC_{local}$ ) in water calculated by MC/IC/UC-K-CHESAR, ERC-ECETOC TRA and spERC-ECETOC TRA according to the annual emission per use: Use No.1: Manufacture of substance, Use No.2: Industrial formulation of preparation, Use No.3: Industrial use as crosslinking agent in the polymer industry, Use No.4: Industrial use in coatings resulting in inclusion into a matrix, Use No.5: Professional use in coatings resulting in inclusion into a matrix.

최종적으로 출력하는  $PEC_{local}$ 은  $C_{local}$ 값에  $PEC_{regional}$ 을 더한 값으로, Table 4b에서 알 수 있듯이 ERC-ECETOC>MC/IC/UC-K-CHESAR>spERC-ECETOC으로 산출되었고, 이는 용도별 배출계수의 순서인 ERC>MC/IC/UC>spERC와 같다(Fig. 3).

Fig. 4는 5가지 용도에 대해 MC/IC/UC-K-CHESAR, ERC-ECETOC, spERC-ECETOC로 구동하여 얻은 PEC 결과에서  $PEC_{local}$ 에 기여하는  $PEC_{regional}$ 의 정도를 알아보기 위해  $PEC_{regional}/PEC_{local}$  비율을 퍼센트로 계산하여 각 용도에 대해 플랫폼 본 결과이다.  $PEC_{local}$ 에 기여하는  $PEC_{regional}$ 의 정도는 전자의 두 경우는 매체가 수계일 때 0%, 0.1%, 2.0%, 10.3%인 반면, 후자 용도 5의 경우는 99.4%, 96.2%였다. 배출계수가 보정이 되어 계산되는 spERC의 경우는 광범위한 분산 사용은 96.2%, 혼합 단계의 사용(CEPE SPERC 2.1c.v1)은 34%였다.

### IV. 고찰

환경 배출을 예측하기 위해서 용도에 따라 분류 체계에 의해 평가 코드를 부여하면, 매체별 배출계수가 확정되고 이를 다음 단계에서 배출량으로 환산한다(배출량=연간 사용량×배출계수). 환경 배출 평가의 결과는 각 용도별로 대기, 토양 및 물에 전국(regional) 환경 및 사업장(local)의 두 가지에 대한 배출량을 산출할 수 있다. 본 연구 대상이 된 5가지 용도에 MC/IC/UC, ERC, spERC 세 가지 다른 타입의 평가 코드를 부여할 수

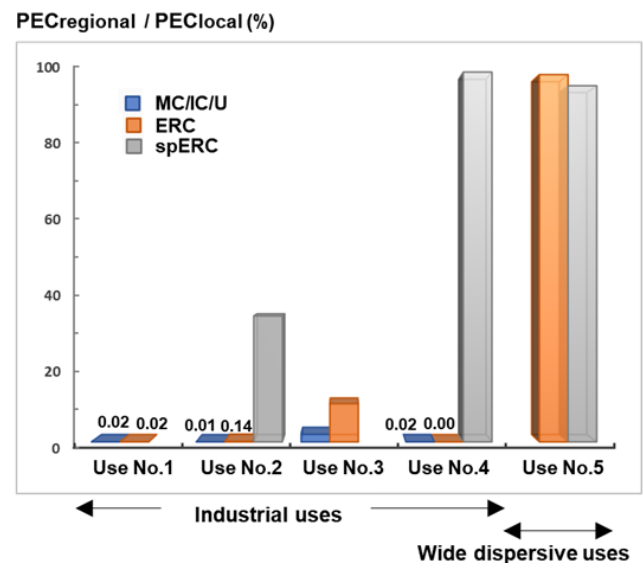


Fig. 4. Different degrees of contribution of  $PEC_{regional}$  to the final  $PEC_{local}$  in water according to different uses: Use No.1: Manufacture of substance, Use No.2: Industrial formulation of preparation, Use No.3: Industrial use as crosslinking agent in the polymer industry, Use No.4: Industrial use in coatings resulting in inclusion into a matrix, Use No.5: Professional use in coatings resulting in inclusion into a matrix.

있었다. 단 MC/IC/UC 체계에서 IC 14뿐만 아니라 모든 IC에 전문가 사용(professional use)에 대한 생애 단계가 포함되어 있지 않으므로<sup>22)</sup> 페인트의 전문가 사용인 용도 5에는 IC 코드 부여가 적합하지 않음을 확인하였다. 산업 분류체계 IC 14는 제조, 혼합, 산업적 사용, 개인적 사용으로 구성되어 있어 용도 4는 용도 2와 마찬가지로 IC 14 중 산업적 사용에 해당하나 용도 5 (전문적 사용)는 IC 14의 적용이 가능하지 않았다. IC 6 (공공영역)은 제조, 혼합, 산업적 사용으로 구성되어 있고 UC 9 (세정제), UC 39 (살균제, 비농업성)와 그 밖의 모든 UC에 따라 구분되어 있다. 페인트 또는 잉크와 같은 산업용 코팅제의 전문적 사용이 IC 6의 그 밖의 모든 UC에 해당된다 하더라도, 생애 단계 구분인 산업적 사용에 속해야만 선택이 가능하므로 적절하지 않는 것으로 사료된다. IC 14뿐만 아니라 16개의 IC 모두 전문적 사용(professional use)에 대해 배출계수가 개발되어 있지 않아 적용 가능한 IC가 없다고 할 수 있으나, EUSES 2.0 문헌<sup>22)</sup>의 본문에 의하면 자동차 수리점의 전문가 페인팅의 경우 IC 15/0 (기타)의 광범위한 분산적 사용에 해당될 수 있다고 하여, 용도 5에 IC 15/0 (기타)의 산업적 사용의 MC IV (wide dispersive use)를 시도하였으나, IC 15/0 배출계수는 0.9 (수계 배출계수) 및 0.005(토양 배출계수)였으며,<sup>22)</sup> 본 연구에서 사용된 배출계수 중 (Table 2a) 가장 월등히 큰 값일 뿐만 아니라 분산적 사용에 적용하기 위해 합리적인 값이 아니어서 적합하지 않다고 사료된다.

배출량 예측(emission estimation)의 경우, 최악의 경우를 기반으로 한 ERC를 시작점으로 하여 해당 산업에 대한 더 상세하고 특수한 정보를 바탕으로 보정된 spERC는 주요 대상 그룹이 산업적 사용, 전문가 사용 및 소비자 사용이고<sup>15)</sup> 5개 용도에서 spERC를 적용할 수 있는 용도는 3개 용도였다. ERC 2가 세분화되어 개선된 10개의 CEPE SPERC 중에서 적합한 SPERC 2.1c.v1를 선택했고 ERC 5가 고체 물질 및 액체 물질에 각 개발된 2개 CEPE SPERC 중 고체 물질인 CEPE SPERC 5.1a.v1를 선택하였으며, ERC 8c를 보정한 전문가의 실내 브러쉬/롤러 사용(CEPE SPERC 8c.2a.v1)을 적용해 보았고 이는 분산적 사용에 해당한다.<sup>15)</sup>

용도별로 살펴 본 매체별 배출계수 순서는 ERC>MC/IC/UC>spERC로서 세 가지 카테고리에 같은 연간 사용 톤 수를 입력하였으므로, 이는 용도별 연간 배출량 순서와도 같다. 실제로 사업장에서는 환경오염방지시설의 사용이 의무화되어 있으며, 고분자 성형 시 가교제(용도 3)나 페인트의 점성조정제로서 산업적/전문적 사용(용도 4 및 용도 5) 시 사례물질은 경화되어 환경 중으로 배출가능성이 매우 낮기 때문에 ERC를 적용한 배출량 예측은 매우 보수적인 추정치임을 확인할 수 있었다. 유럽의 CEPE에서 페인트, 프린트 잉크, 산업용 코팅제, 예술가들의 물감 등에 대한 spERC 개발을 할 때 핵심 목표는 ERC 배출계수를 보정하는 것이었으며, OECD ESD의 코팅 산업으로

시작하여, 옛 데이터는 VOC Directive 99/13/EC를 참조하여 최악의 경우에 대해 보정을 하였다.<sup>15)</sup> 따라서, Table 2a의 3개 spERC의 배출계수값을 살펴보면 매체 모두에서 ERC 배출계수 뿐만 아니라 MC/IC/UC에 의한 배출계수 보다 더 적은 값을 가짐을 확인해 보았다.

MC/IC/UC에 의한 매체별 배출계수 및 ERC와 spERC에 의한 매체별 배출계수는 언급한 바와 같이 ERC>MC/IC/UC>ERC 분류체계 순서인데, 위해성 평가에 최종 사용하는 PEC<sub>local</sub> 값의 순서도 ERC-ECETOC>MC/IC/UC-K-CHESAR>spERC-ECETOC으로 (Table 4b), 배출계수 크기 순서와 같았다. Fig. 3은 PEC<sub>local</sub>을 용도별 연간 배출량에 대해 그래프화한 것으로 후자에 비례하여 전자가 증가하는 경향과 세 가지 카테고리에 따른 PEC<sub>local</sub> 값의 순서 및 용도별 배출량의 순서가 위에서 논의한 순서임을 쉽게 확인할 수 있다.

그러나, PEC<sub>regional</sub> 값은 MC/IC/UC 기반의 K-CHESAR에 의한 PEC<sub>regional</sub> 값이 다른 두 체계의 값보다도 더 낮게 산출되었고 그 이유로는 spERC가 용도 3가지에만 적용되고 다른 2개 용도는 ERC가 적용되어 전국 규모 배출량 산출에 ERC 배출계수에 의한 영향을 일부 받아 MC/IC/UC 기반의 K-CHESAR에 의한 값보다 크게 산출되었기 때문으로 사료된다. 즉, 용도 1과 용도 3은 spERC 적용이 불가능하여 ERC가 적용되어 한 세트로 구동하였으므로(Table 4a의 ECETOC TRA 2nd set) 전국 규모 농도에는 ERC의 배출계수 영향을 일부 받게 된다. K-CHESAR 및 ECETOC TRA에서 전국 규모에 대한 환경농도는 정상상태 분배 모형인 유럽의 SimpleBox에 의한 것으로, 전자는 주요 매개변수들을 국내 한국에 적합하도록 최적화된 한국형 다매체 동태모형(SimpleBox\_STP\_Korea)으로 개발되었으므로,<sup>1)</sup> Table 4a의 전국 규모 환경 농도 값의 차이는 3가지 유형별의 배출계수의 기여도가 가장 크리라 사료된다.

PEC<sub>local</sub> 결과가 차이가 나는 원인은 배출계수에 따른 배출량 산정 결과가 큰 영향을 미치지만, Table 3에 나타난 사용 톤 수, 조업일수, 하수처리 시스템이다. 연간 사용 톤 수를 조업일수로 나누어 조업 기간내 사업장에서 배출되는 일일 배출량(kg/d)을 계산하기 때문에<sup>1,9,14,22)</sup> 조업일수가 작아지면 사업장에서의 일일 배출량이 커지고 C<sub>local</sub> 값을 증가시키는데 기여하게 된다. 용도의 다른 카테고리 적용 시 연 배출량이 같은 예를 Table 4a에서 찾아보면 용도 2의 MC/IC/UC와 ERC에 의한 수계 연 12톤, 용도 3의 MC/IC/UC와 ERC에 의한 수계 배출량 연 0.03, 용도 5의 ERC 및 spERC에 의한 수계 배출량 연 3톤이 있다. 전자의 두 경우는 조업일수가 ECHA Guidance<sup>9)</sup>의 Table R.16-2에 따른 디폴트 값 및 ECETOC TRA 모델의 디폴트 값에 따라<sup>24)</sup> 같은 일 수가 입력되었음에도 PEC<sub>local</sub> 결과가 크게 다르게 나타났다. 후자의 용도 5의 경우는 CEPE SPERC 8c.2a.v1의 하수처리 조건이 해당 산업에 맞추어 CEPE에서 보정하여 더 개선되었음에도 불구하고,<sup>15)</sup> 디폴트 조업일수가 ERC 8c가 365

일, CEPE SPERC 8c.2a.v1가 225일이어서  $C_{local}$  값이 spERC가 조금 더 크게 산출되었으리라 사료된다. 또한, ECETOC TRA와 한국형 다매체동태모형의 또 다른 차이점은 1,200톤의 물질이 사용 주기에 따라 사용되는 과정에서, 전자는 광범위한 분산적 사용은 국가수준에서 그 사용량의 10%만 사용된다고 스케일링 되는데, 후자는 광범위한 분산적 사용에서도 이를 고려없이 직접 100%가 다 사용된다고 가정함에 차이가 발생하게 된다. 그리고 ERC를 적용한 PEC 계산에서는 환경오염방지시설의 효율이 직접적으로 고려되지 않는 반면, spERC의 경우 해당 산업계에서 사용하는 환경오염방지시설의 효율을 고려하여 배출계수가 보정되어 있으므로 이에 따라 결과값이 달라지게 된다.

PEC 결과에서  $PEC_{local}$ 에 기여하는  $PEC_{regional}$ 의 정도를 알아보기 위해  $PEC_{regional}/PEC_{local}$  비율을 퍼센트로 계산해 본 값은 제조, 혼합 및 산업적 사용 단계에서 MC/IC/UC 기반 및 ERC 기반의  $PEC_{local}$  값은  $C_{local}$  값에 의해 결정되는 경향을 보였고,  $PEC_{regional}$ 의 기여도는 매우 작은 것으로 확인되었다. 반면 전문적 사용 단계에서 ERC 및 spERC의  $PEC_{local}$  값은  $C_{local}$ 보다  $PEC_{regional}$ 의 기여도가 큰 것으로 나타났다. 전문적 사용의 경우 광범위한 분산적 사용(wide dispersive use)이므로 지역 및 국지적 오염원을 한정하는 수준에 있어, 각각 0.1과 0.002를 적용하기 때문에  $C_{local}$ 의 값이 매우 작아 보이는 특성이라고 사료된다. spERC의 경우 사업장에서의 배출특성을 현실적으로 보정하여  $C_{local}$ 의 값이 작기 때문에, 광범위한 분산 사용이 아닌 혼합 단계 및 산업적 사용 단계에서도 감소된 값으로 산출되므로  $PEC_{regional}$ 의 기여도가 크게 나타나는 경향이 관찰된다.

Table 3b에서 볼 수 있는 “annual EU tonnage” 및 “fraction of M/I tonnage to region”의 두 입력 항목의 결과는 전국규모 사용량을 대신할 수는 있으나 한국 버전을 마련할 때는 용어의 변경이 필요하리라 사료된다.

ERC/spERC 기반의 ECETOC TRA에 의한  $PEC_{local}$  계산 결과와 MC/IC/UC에 의한 K-CHESAR에 의한  $PEC_{local}$  결과를 비교해보면, 용도별 배출계수(배출량) 비교와 동일한 순서로 spERC에 의한 PEC 계산 결과가 가장 낮은 것으로 나타났다. spERC는 ERC로부터 배출계수를 보정한 것 외에도 ECETOC TRA를 구동 시 디폴트값이 아닌 산업현장으로부터 보정된 값을 수동 입력할 수 있는 Tier 1.5 모델로도 사용할 수 있는데<sup>15)</sup> 보정값을 적극 적용하면 본 연구 결과보다 더 적은  $PEC_{local}$  값 산출이 가능하리라 사료된다.

## V. 결 론

$PEC_{regional}$ 과  $C_{local}$ 의 합으로 구해지는  $PEC_{local}$ 의 관계에서  $PEC_{regional}$ 의  $PEC_{local}$ 에의 기여도가 제조, 혼합, 산업적 사용에서와 같이 미미한 경우와 광범위한 분산적 사용과 같이 거의 대부분을 차지하는 경향을 보임을 확인하였다. 따라서,

$PEC_{regional}/PEC_{local}$  비율(%)은 PEC 계산이 적합하게 잘 수행되었는지 효율적으로 판단해보거나, 이에 벗어나는 경우 원인을 고찰해보는 지표로 사용될 수 있음에 초점을 맞추어 더 많은 사례로 향후 연구가 될 수 있으리라 사료된다. ERC의 배출계수는 현실에 비해 매우 보수적인 추정치가 산출되어 평가에 반영하기 어려운 경우가 발생하기 때문에 spERC를 개발하는 연구가 활발히 이루어지고 있고, 향후 국내 산업계 특성을 반영한 spERC를 도출하는 것이 화학물질 안전관리에 장기적으로 필요하리라 사료되며, 이는 spERC를 사용한 PEC 계산이 가능하도록 ECETOC TRA (environmental assessment)의 한국버전 마련 및 K-CHESAR에의 통합도 수반되어야 함을 시사한다.

## 감사의 글

본 연구는 2023년도 환경부 주관 「화학물질 안전관리 전문인력 양성사업」의 화학물질 특성화대학원 지원 사업을 통한 성과물입니다.

## Conflict of Interest

No potential conflict of interest relevant to this article was reported.

## References

1. National Institute of Environmental Research (NIER). Guidance document for preparation of chemical safety report. Incheon: NIER; 2021 Feb. Report No.: NIER-GP2016-16.
2. Korea Chemicals Management Association. Guideline to Korea Chemical Safety Assessment and Reporting Tool and Exposure Scenario Document and Tool. Available: <http://kchesar.kcma.or.kr/> [Accessed May 10, 2023].
3. National Institute of Environmental Research (NIER). User manual for the estimation model for calculation of predicted environmental concentrations to implement K-REACH. Incheon: NIER; 2017.
4. Cohen Y, Ryan PA. Multimedia modeling of environmental transport: trichloroethylene test case. *Environ Sci Technol*. 1985; 19(5): 412-417.
5. Mackay D, Paterson S, Shiu WY. Generic models for evaluating the regional fate of chemicals. *Chemosphere*. 1992; 24(6): 695-717.
6. National Institute for Public Health and the Environment (RIVM). SimpleBox. Available: <https://www.rivm.nl/en/soil-and-water/simplebox> [Accessed Aug 8, 2023].
7. Hollander A, Schoorl M, van de Meent D. SimpleBox 4.0: improving the model while keeping it simple... *Chemosphere*. 2016; 148: 99-107.
8. van de Meent D. SimpleBox: a generic multimedia fate evaluation model. Bilthoven: National Institute for Public Health and the Environment (RIVM); 1993 Aug. Report No.: 672720 001.
9. European Chemicals Agency (ECHA). Guidance on information



requirements and chemical safety assessment. Chapter R.16: Environmental exposure assessment. Version 3.0. Helsinki: ECHA; 2016.

10. European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals (ECETOC). ECETOC TRA version 3: background and rationale for the improvements. Brussels: ECETOC; 2012 Jul. Technical report No.: 114.
11. Ra JS, Song MH, Choe EK. The application of an EU REACH protocol to the occupational exposure assessment of methanol: targeted risk assessment. *J Environ Health Sci*. 2021; 47(5): 432-445.
12. European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals (ECETOC). Targeted risk assessment user guide for the integrated tool TRAM. Version 3.1. Brussels: ECETOC; 2017.
13. European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals (ECETOC). Addendum to TR114: technical basis for the TRA v3.1. Brussels: ECETOC; 2014 Jun. Technical report No.: 124.
14. European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals (ECETOC). Addendum to ECETOC targeted risk assessment report No. 93. Brussels: ECETOC; 2009 Dec. Technical report No.: 107.
15. European Chemical Industry Council (Cefic). Cefic guidance. Specific environmental release categories (SPERCs) chemical safety assessments, supply chain communication and downstream user compliance. Brussels: Cefic; 2012.
16. European Chemicals Agency. EUSES - European Union System for the Evaluation of Substances. Available: <https://echa.europa.eu/support/dossier-submission-tools/euses> [Accessed Aug 8, 2023].
17. European Chemicals Agency (ECHA). Cefic guidance. How to use EUSES 2.2.0. Helsinki: ECHA; 2019.
18. National Institute for Public Health and the Environment (RIVM). SimpleTreat. Available: <https://www.rivm.nl/en/soil-and-water/simpletreat> [Accessed Aug 8, 2023].
19. Struijs J. Application of SimpleTreat 4.0 in European substance regulations. Project No. (FKZ) 27525. Bilthoven: National Institute of Public Health and the Environment; 2015.
20. European Chemicals Agency (ECHA). Chesar 3 in a nutshell. Helsinki: ECHA; 2018.
21. European Chemicals Agency. Chesar: news. Available: <https://chesar.echa.europa.eu/> [Accessed Mar 6 2023].
22. Lijzen JPA, Rikken MGJ. European Union system for the evaluation of substances 2.0. Version 2.0. Bilthoven: National Institute for Public Health and the Environment (RIVM); 2004 Jan. Report No.: 601900005/2004.
23. Vermeire T, Rikken M, Attias L, Boccardi P, Boeije G, Brooke D, et al. European Union system for the evaluation of substances: the second version. *Chemosphere*. 2005; 59(4): 473-485.
24. European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals. Targeted risk assessment (TRA) public workshop. Available: <https://www.ecetoc.org/event/targeted-risk-assessment-tra-public-workshop/> [Accessed Mar 6, 2023].
25. European Automobile Manufacturers' Association (ACEA). Specific Environmental Release Categories (SPERCs) for industrial use of coatings in installations with wet scrubber for collection of overspray (intermittent release to water due to replacement of scrubber content maximum twice per year): background document. Brussels: ACEA; 2012.
26. Reihlen A, Bahr T, Bögi C, Dobe C, May T, Verdonck F, et al. SPERCs—a tool for environmental emission estimation. *Integr Environ Assess Manag*. 2016; 12(4): 772-781.
27. Sättler D, Schnöder F, Aust N, Ahrens A, Bögi C, Traas T, et al. Specific environmental release categories—a tool for improving chemical safety assessment in the EC—report of a multi-stakeholder workshop. *Integr Environ Assess Manag*. 2012; 8(4): 580-585.
28. Ahrens A, Moilanen M, Martin S, Garcia-John E, Sättler D, Bakker J, et al. European Union regulators and industry agree on improving specific environmental release categories: report from the exchange network for exposure scenarios specific environmental release category workshop on May 13, 2016. *Integr Environ Assess Manag*. 2017; 13(5): 815-820.
29. Concawe. Handbook. Identified uses of petroleum substances. Brussels: Concawe; 2020.
30. European Solvents Industry Group. Environment. Available: <https://www.esig.org/reach-ges/environment/> [Accessed Mar 6, 2023].
31. Korea Chemicals Management Association. K-CHESAR. Version. 5.0. Available: [http://kchesar.kcma.or.kr/Files/Main/K-CHESAR\\_V5.0\\_Setup.exe](http://kchesar.kcma.or.kr/Files/Main/K-CHESAR_V5.0_Setup.exe) [Accessed May 10 2023].
32. European Chemicals Agency. Glycerol, propoxylated, esters with acrylic acid- partition coefficient. Available: <https://echa.europa.eu/registration-dossier/-/registered-dossier/14734/4/8> [Accessed Mar 6, 2023].
33. European Chemicals Agency. Glycerol, propoxylated, esters with acrylic acid - manufacture. Available: <https://echa.europa.eu/registration-dossier/-/registered-dossier/14734/3/1/2> [Accessed May 10, 2023].
34. European Chemicals Agency. Glycerol, propoxylated, esters with acrylic acid - formulation. Available: <https://echa.europa.eu/registration-dossier/-/registered-dossier/14734/3/1/3> [Accessed May 10, 2023].
35. European Chemicals Agency. Glycerol, propoxylated, esters with acrylic acid - uses at industrial sites. Available: <https://echa.europa.eu/registration-dossier/-/registered-dossier/14734/3/1/4> [Accessed May 10, 2023].
36. European Chemicals Agency. Glycerol, propoxylated, esters with acrylic acid - uses by professional workers. Available: <https://echa.europa.eu/registration-dossier/-/registered-dossier/14734/3/1/5> [Accessed May 10, 2023].

〈저자정보〉

전현표(교수), 양지수(수석연구원), 조하나(선임연구원), 최은경(기술고문), 김상현(교수)