

Miljøprojekt Nr. 801 2003

## LCA og kemikalier - forprojekt

Anders Schmidt, Leif Hoffmann og Jan Sandvig Nielsen  
dk-TEKNIK Energi & Miljø

Miljøstyrelsen vil, når lejligheden gives, offentliggøre rapporter og indlæg vedrørende forsknings- og udviklingsprojekter inden for miljøsektoren, finansieret af Miljøstyrelsens undersøgelsesbevilling.

Det skal bemærkes, at en sådan offentliggørelse ikke nødvendigvis betyder, at det pågældende indlæg giver udtryk for Miljøstyrelsens synspunkter.

Offentliggørelsen betyder imidlertid, at Miljøstyrelsen finder, at indholdet udgør et væsentligt indlæg i debatten omkring den danske miljøpolitik.

# Indhold

<b>INDHOLD</b>	<b>3</b>
<b>FORORD</b>	<b>7</b>
<b>SAMMENFATTENDE ARTIKEL</b>	<b>9</b>
FORMÅL MED FORPROJEKTET	9
FUND OG KONKLUSIONER	9
WORKSHOP	10
ANBEFALINGER	11
<b>1 SUMMARY</b>	<b>13</b>
AIM OF THE PILOT PROJECT	13
FINDINGS AND CONCLUSIONS	13
WORKSHOP	14
RECOMMENDATIONS	15
<b>2 FORPROJEKTETS FORMÅL</b>	<b>17</b>
2.1 PROJEKTETS MÅLGRUPPE	17
<b>3 AFHJÆLPNING AF DATAMANGEL VED EFFEKTIVURDERINGER</b>	<b>19</b>
3.1 IUCLID-DATABASEN	19
3.1.1 <i>Introduktion</i>	19
3.1.2 <i>Dataindsamling for HPVC</i>	20
3.1.3 <i>Datastruktur i IUCLID</i>	20
3.1.4 <i>Udtræk og eksport af data fra IUCLID</i>	24
3.1.5 <i>QSAR i IUCLID</i>	24
3.2 EURAM-METODEN	25
3.2.1 <i>Introduktion</i>	25
3.2.2 <i>Miljøscore og ranking</i>	26
3.2.3 <i>Scoring af miljøeffekter</i>	28
3.2.4 <i>Kombineret eksponerings- og effektscore</i>	29
3.2.5 <i>Opsummering – miljøeffektscore</i>	29
3.2.6 <i>Automatiseret dataudvælgelse til brug i EURAM</i>	30
3.2.7 <i>Inddeling i preferenceklasser efter TGD</i>	30
3.2.8 <i>Brug af QSAR i EURAM</i>	32
3.2.9 <i>Relation til UMIP</i>	33
3.3 UMIP, IUCLID OG EURAM	35
3.3.1 <i>Introduktion til UMIP</i>	35
3.3.2 <i>Introduktion til IUCLID</i>	35
3.3.3 <i>Introduktion til EURAM</i>	36
3.3.4 <i>Økotoksicitet i UMIP</i>	37
3.3.5 <i>Økotoksicitetsfaktorer – ØF</i>	38
3.3.6 <i>Kronisk økotoksicitet i vand</i>	38
3.3.7 <i>Akut økotoksicitet i vand</i>	40
3.3.8 <i>Kroniske effekter i jord</i>	41
3.3.9 <i>Effekter i renseanlæg</i>	42
3.3.10 <i>Bionedbrydelighed – BIO</i>	43
3.3.11 <i>Vurdering af human toksicitet i UMIP</i>	44

3.3.12	<i>Diskussion – udnyttelse af data i IUCLID</i>	48
3.3.13	<i>Diskussion – Datakrav i UMIP og EURAM</i>	50
3.4	USES-LCA	51
3.4.1	<i>Eksponering i miljøet</i>	51
3.4.2	<i>Effektvurdering i USES-LCA</i>	52
3.4.3	<i>Relation til UMIP</i>	54
3.5	BRUG AF QSAR TIL EFFEKTVURDERINGER	55
3.5.1	<i>Miljøstyrelsens Vejledende liste til selvklassificering af farlige stoffer</i>	55
3.5.2	<i>Andre faktorer, der indgår i beregning af effektfaktorer</i>	57
3.5.3	<i>Overordnede bemærkninger til anvendelse af QSAR i LCA</i>	58
<b>4</b>	<b>BESKRIVELSE OG VURDERING AF ALTERNATIVE METODER TIL AT LAVE OPGØRELSE (INVENTORIES) FOR KEMIKALIER</b>	<b>59</b>
4.1	INDLEDNING	59
4.2	OPGØRELSE VED FORSKELLIGE PROCESSER TIL SALPETERSYREPRODUKTION	60
4.2.1	<i>Ammoniakforbrug</i>	61
4.2.2	<i>NO<sub>x</sub> emission</i>	61
4.2.3	<i>Vandforbrug</i>	61
4.2.4	<i>Energiforbrug</i>	62
4.2.5	<i>Opgørelser for salpetersyreproduktion</i>	62
4.3	ANVENDELSESOMRÅDER FOR PROCESSIMULERING I LCA PERSPEKTIV	64
4.4	PROCESSIMULERINGS- OG OPTIMERINGSVÆRKTØJER	67
4.5	SAMSPIL MELLEM KENDTE OG UKENDTE VARIABLE	68
4.6	VÆRKTØJER TIL PROCESSIMULERING.	69
4.6.1	<i>Simuleringsværktøjer til procesindustri</i>	69
4.6.2	<i>Dataindhold</i>	71
4.6.3	<i>Datakrav, dataoutput, pålidelighed og præcision</i>	72
4.6.4	<i>Priser</i>	73
4.6.5	<i>Oplæringstid i brug af simuleringsværktøjer og synteseværktøjer.</i>	74
<b>5</b>	<b>VURDERING AF KEMIKALIERS BETYDNING I FORSKELLIGE FASER AF LIVSCYKLUS</b>	<b>76</b>
5.1	ANVENDT METODE	76
5.2	SIMPLIFICERET LIVSFORLØB FOR DE BETRAGTEDE KEMIKALIER	79
5.2.1	<i>Styren (til polystyren)</i>	79
5.2.2	<i>Ethanol</i>	82
5.2.3	<i>Tetrachlorethylen</i>	85
5.2.4	<i>Ammoniak</i>	87
5.3	SAMLET VURDERING	89
<b>6</b>	<b>ANDRE HOLISTISK ORIENTEREDE VÆRKTØJER</b>	<b>92</b>
6.1	CHAINET	92
6.2	PRAKTISKE ERFAINGER MED KOMBINATION AF VÆRKTØJER	95
6.3	KONKLUSIONER	95
<b>7</b>	<b>WORKSHOP</b>	<b>96</b>
7.1	INTRODUKTION	96
7.2	LEIF HOFFMANN: "FIRE SMÅ EKSEMPLER..."	97
7.3	JAN SANDVIG NIELSEN: "VÆRKTØJER TIL PROCESOPTIMERING"	98
7.4	MICHAEL HAUSCHILD/LOUISE DREYER: "ESTIMATION AF OPSTRØMS EMISSIONER I LCA"	99
7.5	ANDERS SCHMIDT: "DATAINDHOLD I IUCLID/ ELEMENTER I EURAM"	100

7.6	OLE CHRISTIAN HANSEN (TI): "ANVENDELSE AF QSAR VED DATAMANGEL"	101
7.7	MICHAEL HAUSCHILD: "OMNIITOX -PROJEKTET"	102
7.8	THOMAS P. KROG, PRODUKTREGISTRET	103
7.9	AFSLUTTENDE DISKUSSION OG ANBEFALINGER	104
7.10	DELTAGERLISTE TIL WORKSHOPPEN	105
	<b>REFERENCER</b>	<b>106</b>



# Forord

Forprojektet "LCA og kemikalier", der er gennemført af dk-TEKNIK ENERGI & MILJØ i perioden 2000-2002 afrapporteres i den nærværende rapport. Forprojektet er støttet af Miljøstyrelsen, Rådet vedrørende Renere Produkter.

Vurdering af kemikaliers belastning af menneskers sundhed og det lokale naturmiljø i livscyklusperspektiv er ofte forbundet med en stor usikkerhed, sammenlignet med vurdering af andre effektkategorier. Årsagen til dette er, at der generelt er tale om mangelfulde opgørelser og/eller manglende data til en god effektvurdering.

Miljøstyrelsen har derfor iværksat dette forprojekt, der undersøger en række muligheder for at forbedre begge disse elementer i en samlet vurdering.

Forprojektet er blevet forsinket undervejs, hvilket har betydet at nogle af projektets anbefalinger allerede er iværksat, eller at de ikke er så realistiske at gennemføre på nuværende tidspunkt. Konklusioner og anbefalinger kan imidlertid stadig anvendes som et overordnet idekatalog til fremtidigt LCA-arbejde.

Der har ikke været tilknyttet en følge- eller styregruppe til projektet. I stedet for blev projektets resultater præsenteret på afsluttende workshop med ca. 25 deltagere. På workshopen blev der også præsenteret en række andre initiativer på LCA og kemikalieområdet, således at deltagerne fik et godt overblik over status.

Christian Poll, Miljøstyrelsen (nu IPU, DTU), takkes for værdifuld sparring i hele projektperioden, ligesom de talrige andre kolleger, der har videregivet viden og ideer til projektgruppen.





# Sammenfattende artikel

Formål med forprojektet

Forprojektet omkring LCA-metodeudvikling indenfor kemikalieområdet har haft følgende formål:

- En vurdering af, hvilke effektkategorier der er af størst betydning for kemikalier i henholdsvis produktions-, brugs- og bortskaffelsesfasen.
- En vurdering af, hvordan IUCLID-databasen kan udnyttes til at udbygge og forbedre UMIP-databasens og -metodens kemikaliehåndtering.
- En analyse af muligheden for at bruge EURAM-ranking proceduren til at reducere den usikkerhed, som et dårligt datagrundlag giver ved vurdering af enkeltstoffer.
- En analyse af, hvilke elementer i EURAM-ranking proceduren, USES-modellen og risikovurdering, der tillægges størst betydning i beslutningsprocessen.
- En oversigt over andre holistisk orienterede værktøjer (f.eks. MFA, SFA, IOA og MIPS) med fokus på, om der er enkeltelementer i disse metoder, der kan afhjælpe datamanglen i UMIP.
- En beskrivelse og vurdering af værktøjer til procesoptimering, herunder en demonstration af et specifikt værktøj ved hjælp af en case.

Fund og konklusioner

Overordnet set konkluderes det, at UMIP's metode(r) til kemikalievurdering er i god overensstemmelse med god videnskabelig praksis omkring risikovurdering og fastsættelse af grænseværdier. Der kan ikke på baggrund af forprojektet peges på enkeltelementer i metoden, der kan erstattes af andre elementer og derigennem give en større præcision og/eller en hurtigere vurdering.

En simplificeret LCA af fire kemikalier med vidt forskellige livsforløb viser, at der både på *inventory*- og effektsiden er adskillige potentielle kilder til usikkerhed, og at der ikke umiddelbart kan peges på en genvej til at reducere usikkerheden. For kemikalier, der håndteres i lukkede processer, er bidrag til lokale miljø- og sundhedsbelastninger ofte dog meget beskedne i forhold til andre effekttyper, hvorfor usikre effektfaktorer og/eller emissionsdata ofte vil være af mindre betydning. Casene understreger således også, at det er nødvendigt med et solidt kendskab til LCA-metodens elementer og datagrundlag, hvis der skal kunne drages rimeligt sikre konklusioner af en LCA.

IUCLID-databasen indeholder store mængder af information, der er relevante ved udarbejdelse af effektfaktorer for kemiske stoffer. Informationerne er imidlertid svære at anvende, primært fordi der ikke i den kommercielt tilgængelige version kan skabes et overblik over sammenhængen mellem de fundne værdier, f.eks. for økotoksicitet, og undersøgelsernes kvalitet. Myndighedsversionen giver mulighed for at lave udtræk fra databasen, hvilket er blevet udnyttet i forbindelse med EU's risk ranking af High Production

Volume Chemicals i EU ved hjælp af EURAM-metoden. Et tilsvarende udtræk vil kunne anvendes til at øge mængden af stoffer, for hvilke der er effektfaktorer i UMIP. Det skal dog understreges, at kvaliteten af disse effektfaktorer langt hen ad vejen vil være ukendt.

Muligheden for at afhjælpe datamanglen i UMIP ved at konsultere andre holistiske værktøjer vurderes at være meget begrænset. De fleste værktøjer anvender de samme grundlæggende datakilder som LCA, og der er derfor mulighed for direkte udveksling/brug af udvalgte data. Mængden af tilgængelige data fra andre værktøjer er dog begrænset, idet de ofte fokuserer på enkeltstoffer eller materialer, som analyseres meget detaljeret. CHAINET-arbejdet, der har ligget til grund for gennemgangen i dette forprojekt, munder da også ud i en anbefaling af en sekventiel eller parallel brug af værktøjerne med henblik på at få en bredere vurdering af en given problemstilling.

Værktøjer til procesoptimering kan anvendes til at fremskaffe informationer om ressource- og energiforbrug ved produktion af kemiske stoffer. En umiddelbar fordel er, at brug af allokering i multi-output processer som regel kan undgås, men værktøjerne er ressourcekrævende at anvende, hvis formålet alene er at fremskaffe LCA-data. Industriens motivation for at bruge simulerings- og synteseværktøjer er primært, at der kan være store økonomiske gevinster at hente på energi- og ressourceoptimering. Der findes dog også eksempler på, at en bred vifte af miljøparametre, som de kendes fra LCA, anvendes direkte i optimeringen. Dette kræver en vægtningsmekanisme, hvis nærmere indhold ikke er kendt på nuværende tidspunkt.

## Workshop

De ovenstående fund og konklusioner blev præsenteret på en workshop sammen andre indlæg, således at der kunne skabes et overblik over de igangværende initiativer på LCA og kemikalieområdet.

Blandt de mest interessante indlæg var et om anvendelse af EU's Technical Guidance Document (TGD) til at kvantificere procesrelaterede emissioner i den kemiske industri. TGD indeholder blandt andet et værktøj, der på baggrund af viden om de tekniske specifikationer om processerne og de anvendte stoffers fysisk-kemiske egenskaber kan beregne emissioner i forskellige processer opstrøms i kemikalieproduktionen. Selvom værktøjet er forholdsvis tidskrævende at anvende, vil det kunne anvendes til at udfylde huller i livscyklusopgørelser, f.eks. i form af dårlig eller manglende speciering af udledninger. Sammen med et værktøj til procesoptimering er det således i princippet muligt at udarbejde forholdsvis detaljerede opgørelser alene på baggrund af et kendskab til procesparametre, således som de foreligger i den tekniske litteratur.

Et andet indlæg om det EU-finansierede OMNIITOX-projekt viste, at der i øjeblikket er et projekt i gang, der i løbet af cirka to år vil kunne medføre væsentlige ændringer i kemikalievurderinger i LCA. I bedste fald vil resultatet blive en fælles europæisk metode med et højt detaljeringsniveau; alternativt vil der blive tale om flere metoder med et lavere detaljeringsniveau, men med en gennemført vurdering af flere tusinde stoffer. Med et så væsentligt projekt – budgettet er 3,3 millioner EURO – er det vanskeligt at pege på danske initiativer i forbindelse med effektivurderinger i LCA, som det vil være værd at investere de store ressourcer i. Med i dette billede hører også, at projektets tidshorizont er forholdsvis kort, og at der derfor i løbet af et års tid vil tegne

sig et bedre billede af anbefalelsesværdige initiativer. Det skal dog bemærkes, at der på workshoppen var et udbredt ønske om at blive holdt orienteret om udviklingen i projektet, blandt andet omkring datakrav og dataformat, således at danske institutioner kan være forberedt på at anvende metoden, når den er færdig. Et dansk støtteprojekt, hvor metoden bliver afprøvet, blev også nævnt som en mulighed.

## Anbefalinger

De følgende anbefalinger er blevet udarbejdet, inden OMNIITOX-projektet blev præsenteret på den afsluttende workshop i forprojektet. Som nævnt ovenfor giver OMNIITOX-projektet nogle helt nye muligheder i relation til kemikalievurdering i LCA. De nedenstående anbefalinger er således kun relevante, hvis der fra centralt hold ønskes at arbejde videre med UMIP-metoden i sin nuværende form.

UMIP's database over effektfaktorer kan forbedres væsentligt gennem en centralt styret indsats, f.eks. i form af et hovedprojekt. Det anbefales, at forbedringen sigter både på at øge antallet af stoffer, for hvilke der er effektfaktorer, og kvaliteten af de enkelte faktorer.

Følgende elementer vurderes at være specielt interessante i forbindelse med en opdatering af databasen:

- Udarbejdelse af et standardformat til lagring og rapportering af effektdata for enkeltstoffer. Formatet skal være af en sådan karakter, at alle enkeltinformationer og deres kilder kan genfindes, gerne med mulighed for at knytte kommentarer til de valg, der er truffet, specielt i relation til datakvaliteten.
- Udarbejdelse af et PC-program med de beregningsformler, der anvendes i UMIP-metoden. Det foreslås, at standardformat og beregningsformler integreres i et enkelt værktøj, der skal kunne indgå som en komponent i de LCA-værktøjer, der bruger UMIP som vurderingsmetode. Det skal i denne forbindelse bemærkes, at værktøjet skal være udstyret med de nødvendige import- og eksportfaciliteter, d.v.s. at der blandt andet skal være sikret imod utilsigtet overskrivelse af allerede eksisterende datasæt.
- Udarbejdelse af en procedure for udtræk fra IUCLID-databasen, for eksempel i form af en analogi til den automatiserede dataudvælgelsesprocedure i EURAM ranking-proceduren. Det skal bemærkes, at denne mulighed er afhængig af, at der kan opnås de fornødne tilladelser fra JRC/ECB. Hvis disse ikke kan opnås, må der beskrives en manuel procedure.
- Udtræk fra IUCLID. Omfanget af dette udtræk afhænger til dels af de tilladelser, der kan skaffes fra JRC/ECB. Med i overvejelserne hører også, hvilke stoffer, det på nuværende tidspunkt er størst behov for at have effektfaktorer for. For eksempel kunne arbejdet rettes mod de stoffer og stofgrupper, hvor der er igangværende eller planlagte indsatser. Det foreslås, at Miljøstyrelsen afklarer disse spørgsmål inden et eventuelt hovedprojekt sendes i udbud.

- Udarbejdelse af procedure for kvalitetskontrol. Som led i vurderingen af enkeltstoffer skal der udarbejdes en kvalitetskontrol. Procedure og omfang vil være afhængig af den metode, der anvendes til udtræk fra IUCLID (automatiseret eller manuel). Som led i kvalitetskontrollen foreslås det, at resultatet af hver revurdering sammenlignes med de værdier for effektfaktorer, der i dag findes i UMIP. På denne måde kan der opnås en indikation af, hvor stor en variation, der kan være ved enkeltpersoners vurdering af det samme stof.
- Gennemførelse af kvalitetskontrol.

Resultatet af de ovenstående aktiviteter er en offentlig tilgængelig database med de grundlæggende data til effektvurdering af en lang række (op til 2500) enkeltstoffer, et beregningsprogram til nemt at gennemføre supplerende effektvurderinger, samt en mulighed for at udveksle/opdatere databasen på en operationel måde. Det understreges dog, at kvaliteten af et udtræk fra IUCLID-databasen stort set vil være ukendt.

En alternativ mulighed er derfor at gennemføre en kvalitetssikret opdatering af effektfaktorerne i UMIP og eventuelt en udvidelse af antallet. De grundlæggende elementer er de samme som ved et computerbaseret udtræk, nemlig fastlæggelse af standardformat for lagring og rapportering samt udarbejdelse af beregningsværktøj til PC-brug. Rækkefølgen af stoffer, for hvilke effektfaktorer skal opdateres eller nye skal udarbejdes, kan baseres på UMIP-brugernes erfaringer med hensyn til vigtighed (hvilke stoffer slår traditionelt igennem i tox/økotox-vurderinger). Det er dog også af stor vigtighed at sikre, at stoffer og stofgrupper, der er væsentlige i UMIP-vurderinger af nye problemstillinger, vurderes med den højest mulige kvalitet. En sådan vurdering kan gennemføres af et ekspertpanel, der for eksempel kan have tilknytning til et kommende LCA-videncenter.

På procesoptimeringsområdet foreslås det, at mulighederne for at integrere miljøhensyn, f.eks. i form af UMIP-vurderinger, i simulerings- og synteseværktøjer undersøges nærmere. Brugen af værktøjerne er forholdsvis begrænset i dag, men det fremtidige potentiale vokser, efterhånden som præcision og anvendelighed forbedres, samtidig med at ressourcekravet mindskes. Et specielt problem ved en sådan integration er, at den sandsynligvis vil kræve en anden type vægtning end den eksisterende. Et første skridt kan derfor være at undersøge, hvordan de overordnede rammer for og krav til en integration af miljø og økonomi i procesoptimering kan formuleres.

# 1 Summary

Aim of the pilot project

The pilot project described in the report has had the following aims:

- An assessment of which impact categories that are most important for chemicals in the stages of production, use and disposal.
- An assessment of if and how the IUCLID-database can be utilised to extend and improve the database and assessment methods in the EDIP LCV-tool.
- An analysis of the possibilities for using the EURAM ranking methodology to reduce the uncertainty caused by an inadequate database in assessment of single substances.
- An analysis of which elements in the EURAM-ranking methodology, the USES-model and in risk assessment that are most important in the decision-making process.
- An overview of other holistic tools (e.g. MFA, SFA, IOA, MIPS) with focus on identification of single elements that can remedy lack of data in the EDIP assessment methods.
- A description and assessment of tools for process optimisation, including demonstration of one of the tools in a specific case.

Findings and conclusions

It is initially concluded that the EDIP assessment methods for chemical impacts are in accordance with good scientific practice regarding risk assessment and establishing of (scientific) threshold limit values. It is not possible to point to single elements in the method that can be replaced by other elements and thereby increase the precision in the assessment and/or an easier procedure.

Simplified LCA's of four chemicals with significantly different life cycles show that there both in inventory and impact assessment are several potential sources of uncertainties and that it is not possible to point to short-cuts or general rules of thumb that can reduce this uncertainty. For chemicals that are handled in closed systems it can however be assumed that the contributions to impacts on human health and the local environment are modest compared to the contribution to other impact categories. Therefore, uncertain effect factors and/or emission data often are of minor importance in such cases. Together, the four cases demonstrate that it is necessary with a thorough knowledge of the elements and the database in the LCA methodology if consistent conclusions are to be drawn from a LCA.

The IUCLID-database contains large amounts of information that are relevant in the establishing of effect factors for chemical compounds in LCA. The information is however difficult to use, primarily because it is not possible in the commercial version of the database to create an overview of data regarding e.g. ecotoxicity and the quality of the underlying study. The version used by governmental institutions allows for extraction of specified data sets, and this possibility has been utilised in the EU risk ranking of High Production Volume Chemicals (HPVC). A similar extraction of data can be used to increase the amount of substances for which effect factors are available in the EDIP database, but it is emphasised that the quality of such effect factors will be largely unknown.

The possibility of decreasing the lack of data in EDIP by using information from other holistic tools is seen as very limited. Most tools use the same basic information sources as LCA and there is thus always a possibility for direct exchange and use of selected data. The amount of available data from other tools is however limited as the tools often focus on single substances or materials that are being analysed in great detail. The CHAINET concerted action programme which has been the main information source regarding holistic tools thus also recommends that the different tools are used in a sequential or parallel manner in order to obtain a broader assessment of a given problem area.

Tools for process optimisation can be used to produce information on resource and energy consumption in production of chemical substances. An advantage of these tools is that allocation in multi-output processes can be avoided, but it must also be recognised that the use of the tools is rather resource demanding if the sole purpose is to produce LCA-data. The motivation for industries to use process optimisation is primarily that the economic benefits may be very large and environmental concerns only play a secondary role. There are however also examples that a broad range on environmental parameters (as known in LCA) are used directly in the optimisation. A basic requirement for this is that some kind of weighting procedure is applied, but the exact conditions are not known at present.

## Workshop

In order to create an overview of current Danish and international initiatives in the area of LCA and chemicals, the findings and conclusions from the pilot project were presented at a workshop, together with presentations of initiatives of other research groups.

Among the most interesting presentations was one regarding the use of the EU Technical Guidance Document (TGD) to quantify process related emissions in the chemical industry. TGD contain among other things a tool than can be used to calculate upstream emissions, based on knowledge about processes and physical-chemical properties of the chemicals used. The tool is rather demanding in terms of time, but will be able to fill gaps in inventories, e.g. regarding speciation of chemicals emitted. Together with a process optimisation tools, focusing on energy consumption, it is thus possible to establish relatively detailed inventories, based solely on the knowledge about process parameters that can be found in the technical literature.

A presentation of the EU-funded OMNIITOX-project indicated that significant changes in the way chemicals are handled in LCA can be expected

within two years. At best, the result will be a common European methodology with a high level of detail in the assessments. Alternatively, several methods may be available at the end of the project. These will have a lower level of detail, but an assessment of potentially several thousands of chemicals will have been performed. With this essential project – the budget is 3.3 million EURO – is it difficult to point to short-term Danish initiatives regarding impact assessment that will be worth the effort. The participants at the workshop however had a great wish to be kept informed about the developments in the project, e.g. regarding data format and requirements, so they could be prepared to use the method when it is finished. The possibility of a Danish support project was also mentioned.

## Recommendations

The EDIP database on effect factors can be improved significantly by a centrally coordinated effort, e.g. in the form of a main project. It is recommended that such a project aims at both increasing the number of substances for which effect factors are available and at increasing the quality of the single factors.

The following elements are regarded as being of special interest in relation to updating of the EDIP database:

- Development of a standard format for storing and reporting of effect data for chemical substances. The format should allow all single information and their sources to be retrieved, preferably with a possibility of commenting the choices that have been made, e.g. with respect to data quality.
- Development of a PC-programme with the formulas used for calculations of effect factors in EDIP. It is suggested that the standard format and the calculation formulas are made as a component that can be integrated in the LCA-tools that includes EDIP as an assessment method. It is remarked in this context that the tool should contain the necessary facilities for im- and export of data, including protection against unintentional overwriting of already existing data.
- Development of a procedure for extraction of data from IUCLID, e.g. in an analogous way to the automated data extraction procedure used in the EURAM ranking procedure. This option depends on the possibility of getting access to the version of IUCLID used by governmental institutions, i.e. following approval by Joint Research Centre and ECB in Ispra. Extraction of data from IUCLID could initially be tested in relation to specific substances or groups of substances for which there are ongoing or planned future activities in Denmark.
- Development of a procedure for quality control as an element in the assessment of chemical substances. The procedure and extent depends of the suggested method for extraction of data from IUCLID (automated or manual). As an element in the quality control it is suggested that each re-assessment of a chemical substance is accompanied by a comparison with the present values in the EDIP database. In this way, an indication of the variation between different

persons assessing the same substance can be achieved, contributing to the knowledge about weak and strong sides of the methodology.

- Completion of quality control.

The result of the activities outlined above is a publicly available database with the basic data for an effect assessment of a large number of chemicals, potentially up to 2500, a calculation programme for easy calculation of supplementary effect assessments and a possibility for exchange and updating of the database in an operational way. It must however be stressed that the quality of information extracted from IUCLID will be largely unknown.

An alternative possibility is therefore to conduct a quality-controlled updating of the effect factors in EDIP and optionally supply similar information for additional substances. The basic elements are the same as when using an automated extraction procedure, i.e. development of a standard format for storing and reporting of data, and development of a calculation tool for pc's. The order in which effect factors are to be updated or developed can be based on the experiences of EDIP-users with respect to their importance (e.g. chemicals that traditionally are of importance in assessment of local health and environmental impacts, frequently used chemicals, etc.). It is also of great importance to ensure that effect factors for chemical substances and groups of substances that are important in EDIP-assessments are derived with the best possible quality. This can be done by using an expert panel, possibly associated to a coming LCA knowledge centre.

In the area of process optimisation it is suggested to further investigate the possibilities for integrating environmental considerations, e.g. in the form of EDIP-assessments, in tools for process optimisation and simulation. The use of this type of tools is rather limited at present, but the future potential is increasing following improvements in precision and usability. A special problem in such an integration is that it will probably require another weighting procedure than in EDIP. The first step can therefore be to investigate how the framework and demands for an integration of economy and environment in process optimisation can be formulated.



## 2 Forprojektets formål

Forprojektets overordnede formål er at belyse mål og muligheder for at udvikle UMIP-metodens kemikaliehåndtering. Resultatet af forprojektet skal danne grundlag for en eventuel senere indkaldelse af projektforslag til et hovedprojekt. Projektets formål er således tæt knyttet til resultatmålene i afsnit 3.1 i prioriteringsplanen for programmet for renere produkter.

For at opfylde det overordnede formål opstilles en række delmål:

- At vurdere, hvilke andre typer af vurderingsmetoder der vil kunne udnyttes ved effektvurdering af flere/adskillige kemiske stoffer, f.eks. som led i opbygning/udvidelse af UMIP-databasen eller som led i en eventuel metodeændring.
- At identificere, hvilke effektkategorier i LCA der er vigtige for kemiske produkter i henholdsvis produktions-, brugs- og bortskaffelsesfasen.
- At vurdere, hvilke metoder der vil kunne anvendes til at lave "standard-opgørelser" af miljøbelastningen ved produktion af kemiske stoffer og dermed forbedre UMIP's datagrundlag også på *inventory*-delen

Gennem at opfylde disse formål opnås et overblik og en viden om, hvor behovet for dataindsamling og -vurdering ved LCA af kemiske produkter er størst, og hvilke muligheder der er for at dække disse behov. Denne viden udnyttes til at opstille de rammer, som et eventuelt efterfølgende hovedprojekt skal udfylde.

### 2.1 Projektets målgruppe

Den primære målgruppe for projektet er Miljøstyrelsen, der med den afsluttende rapportering fra forprojektet får et væsentligt input til at konkretisere et eventuelt efterfølgende hovedprojekt. Den sekundære målgruppe for forprojektet er danske LCA-interesserede, der gennem forprojektet kan få mulighed for at overveje, hvordan de bedst muligt kan bidrage til en forbedret kemikalievurdering i LCA på både kort og langt sigt.



# 3 Afhjælpning af datamangel ved effektvurderinger

Vurdering af kemikaliers potentielle human- og økotoxikologiske effekter i LCA foretages ved hjælp af modelberegninger, der generelt tager udgangspunkt i stoffernes toksikologiske og fysisk/kemiske egenskaber. Der anvendes i høj grad de samme data og principper i LCA som i fare- og risikovurdering (*hazard og risk assessment*), og det skulle derfor i princippet være forholdsvis simpelt at overføre data mellem forskellige modeller.

I dette kapitel beskrives to relativt nye værktøjer, IUCLID og EURAM, der er udviklet til at henholdsvis at lagre og håndtere kemikaliedata til brug i de første skridt i EU's risikovurdering af eksisterende og nye stoffer. Endvidere beskrives den hollandske LCA-model til vurdering af toksikologiske og økotoxikologiske effekter, USES-LCA.

I kapitlet drages der paralleller mellem UMIP og de tre værktøjer med henblik på at identificere potentielle genveje til at reducere usikkerheden i UMIPs effektvurderinger og til at supplere effekt databasen med både bedre data og data for andre/flere stoffer end de, der i dag findes i effekt databasen.

## 3.1 IUCLID-databasen

### 3.1.1 Introduktion

IUCLID-databasen (International Uniform Chemical Information Database) er det grundlæggende europæiske værktøj til dataindsamling og vurdering indenfor EU's Risikovurderingsprogram. Datastrukturen er designet, så den beskriver effekten af kemiske stoffer på menneskers sundhed og miljøet.

En database vedrørende eksisterende stoffer er under udarbejdelse af European Chemicals Bureau (ECB). Denne database inkluderer alle de datasæt, som industrien videregiver ifølge Council Regulation 793/93 (CEC, 1993) vedrørende "Evaluation and Control of the Risks of Existing Substances". Forordningen forpligter industrien til at indsamle og videregive let-tilgængelig information om HPVC-stoffer til myndigheder, incl. EU-Kommisionen, industri, interesseorganisationer og den almindelige offentlighed. I praksis omfatter HPVC alle de stoffer, der bliver produceret i eller importeret til EU i mængder, der er større end 1000 tons om året.

I øjeblikket indeholder databasen 30.000 datasæt for omkring 10.000 stoffer. Alle data er ved at blive distribueret til de kompetente myndigheder i medlemslandene. Derudover findes der en database på CD-ROM, der indeholder ikke-fortrolige data og som er kommercielt tilgængelig for en pris på 100 EURO. Denne database indeholder oplysninger om 2.607 stoffer, alle HPVC, og det er denne database, der ligger til grund for den følgende gennemgang. det skal dog bemærkes, at antallet af stoffer og procentdele af tilgængelige oplysninger er beskrevet ud fra indholdet i IUCLID i december, 1998, hvor databasen indeholdt 2465 stoffer (Allanou *et al.*, 1999).

De 2465 stoffer er fordelt på følgende klasser af kemiske stoffer:

Tabel 1. . Oversigt over indholdet i IUCLID, fordelt på klasser af kemiske stoffer

Klasse af kemiske stoffer	Antal af stoffer
Uorganiske forbindelser, incl. salte	345
Kul- og petroleumbaserede forbindelser	416
Ukendte forbindelser eller forbindelser med variabel sammensætning, komplekse reaktionsprodukter eller biologisk materiale	280
"Diskrete" organiske forbindelser	1166
Blandinger af diskrete organiske forbindelser	224
Organometaliske forbindelser	34
Total	2465

Forskellen mellem den "store" database og den kommercielle version er først og fremmest antallet af stoffer, for hvilke der er data (10.000 henholdsvis 2.605) samt at den "store" database også indeholder de fortrolige oplysninger om alle stoffer, som en producent eller importør har videregivet til ECB. Den store forskel i antallet af stoffer skyldes formentlig, at den "store" database også indeholder en del oplysninger om Low Production Volume Chemicals (LPVC), d.v.s. stoffer der produceres eller importeres i mængder mellem 10 og 1000 tons om året. Det skal bemærkes, at kravene til oplysninger om LPVC er væsentligt mindre end for HPVC, nemlig stofnavn, produceret/importeret mængde, oplysninger om klassificering og mærkning i henhold til Direktiv 67/548 samt et rimeligt skøn over brugsmønstre.

### 3.1.2 Dataindsamling for HPVC

Indsamlingen af data til IUCLID er blevet operationaliseret gennem udvikling af en speciel HEDSET-software pakke (Harmonised Electronic Data-set), der kan bruges på almindelige PC'ere. HEDSET-softwaren er menu-dreven, hvor brugeren får mulighed for at vælge mellem en række foruddefinerede muligheder, f.eks. testarter eller testmetoder, når der indtastes data for et stof.

Efterfølgende kan oplysningerne eksporteres til en diskette, der sendes til Sikkerhedskontoret i EU's Joint Research Centre i Ispra, hvorfra data sendes videre til ECB for databehandling, lagring i IUCLID og eventuel videre distribution.

### 3.1.3 Datastruktur i IUCLID

De data, der skal rapporteres af de enkelte producenter/importører til Kommissionen vedrørende alle kemiske stoffer, inkluderer:

- Stofnavn
- Producerede/importerede mængder
- Information om klassificering og mærkning i relation til Direktiv 67/548
- Et rimeligt skøn over brugsmønstre

Endvidere skal følgende data yderligere rapporteres for HPVC:

- Fysisk-kemiske egenskaber
- Information om stoffernes fordeling og skæbne i miljøet
- Toksikologiske og økotoksikologiske egenskaber

### 3.1.3.1 Indholdet i databasen

I de to nedenstående tabeller er det opgjort, hvor stor en del af de enkelte informationer, der samlet set var tilstede i databasen i december, 1998:

Tabel 2. Oversigt over IUCLID kapitler og underkapitler. Producentrelateret del (Kapitel 1)

Kapitel	Kapiteloverskrift	Tilgængelighed
1	Generel Information	
1.1*	Generel Stofinformation	99.63%
1.2	Synonymer	94.20%
1.3*	Urenheder	71.85%
1.4*	Additiver	45.40%
1.5*	Mængde	100.00%
1.6.1*	Mærkning	97.93%
1.6.2*	Klassificering	97.36%
1.7*	Brugsmønstre	99.59%
1.8	Grænseværdi i arbejdsmiljøet	76.15%
1.9*	Eksponeringskilder	67.14%
1.10	Vandforurening	41.74%
1.11	Væsentlige ulykkesrisici	33.59%
1.12	Luftforurening	25.72%
1.13*	Yderligere bemærkninger	55.01%

Del af informationen i '\*' markerede underkapitler er for nuværende fortrolige, men kan eventuelt offentliggøres i fremtiden.

Tabel 3. IUCLID kapitler og underkapitler: Stofrelateret del (Kapitel 2 - 5)

Kapitel	Kapiteloverskrift	Tilgængelighed
2	Fysisk-kemiske data	
2.1	Smeltepunkt	75.46%
2.2	Kogepunkt	68.76%
2.3	Vægtfylde	84.54%
2.4	Damptryk	61.14%
2.5	Fordelingskoefficient	58.38%
2.6	Opløselighed i vand	76.23%
2.7	Flammepunkt	65.56%
2.8	Selvantændelse	41.38%
2.9	Brændbarhed	40.37%
2.10	Ekspløseionsegenskaber	44.83%
2.11	Iltningsegenskaber	27.42%
2.12	Yderligere bemærkninger	51.03%
3	Skæbne og veje i miljøet	
3.1.1	Lysnedbrydning	47.59%
3.1.2	Stabilitet i vand	40.81%
3.1.3	Stabilitet i jord	23.16%
3.2	Overvågningsdata (miljø)	22.88%
3.3.1	Transport mellem compartments i miljøet	25.48%
3.3.2	Distribution	31.24%
3.4	Nedbrydningsmåder ved aktuel brug	25.52%
3.5	Bionedbrydelighed	60.57%
3.6	BOD5, COD eller BOD5/COD Ratio	26.29%
3.7	Bioakkumulering	29.94%
3.8	Yderligere bemærkninger	25.23%
4	Økotoxicitet	
4.1	Akut/forlænget toksicitet over for fisk	67.95%
4.2	Akut toksicitet over for vandlevende invertebrater	54.65%
4.3	Toksicitet overfor vandlevende planter,	45.56%

Kapitel	Kapiteloverskrift	Tilgængelighed
	f.eks. alger	
4.4	Toksicitet overfor mikroorganismer, f.eks. bakterier	56.92%
4.5.1	Kronisk toksicitet over for fisk	13.71%
4.5.2	Kronisk toksicitet over for vandlevende invertebrater	17.77%
4.6.1	Toksicitet over for jordlevende organismer	30.30%
4.6.2	Toksicitet overfor planter i jord	31.76%
4.6.3	Toksicitet overfor andre ikke-pattedyr (jordlevende)	32.70%
4.7	Overvågning af biologiske effekter	25.80%
4.8	Biologisk omdannelse og kinetik	26.98%
4.9	Yderligere bemærkninger	35.82%
5	Toksicitet	
5.1.1	Akut oral toksicitet	76.96%
5.1.2	Akut inhalationstoksicitet	50.75%
5.1.3	Akut hudtoksicitet	52.94%
5.1.4	Akut toksicitet, andre eksponeringsveje	35.01%
5.2.1	Hudirritation	73.27%
5.2.2	Øjenirritation	72.90%
5.3	Sensibilisering	48.32%
5.4	Toksicitet ved gentagne doser	58.17%
5.5	Genetisk toksicitet <i>in vitro</i>	66.94%
5.6	Genetisk toksicitet <i>in vivo</i>	37.89%
5.7	Carcinogenicitet	43.89%
5.8	Reproduktionstoksicitet	26.00%
5.9	Teratogenicitet	32.01%
5.10	Anden relevant information	51.93%
5.11	Erfaringer med eksponering af mennesker	55.94%

De ovenstående tabeller giver et indtryk af, hvor store mængder data, der ligger i den kommercielle version af IUCLID. Tabellerne giver imidlertid ikke et indtryk af datakvaliteten, for eksempel kvaliteten af testmetoderne (målte værdier eller beregnet efter QSAR), eller om antallet af tests (underkapitler) på de enkelte stoffer.

Det er heller ikke muligt i den kommercielle version at skaffe sig dette overblik. Søgmulighederne er begrænset til søgning på følgende elementer:

- CAS-nummer
- EINECS-nummer
- EINECS-navn
- Synonymer og
- R-sætninger

Den eneste søgemulighed, der således giver mere end et resultat med hensyn til stoffer, der lever op til kriterierne, er R-sætninger. Dette betyder, at det ikke er muligt at få et detaljeret overblik over datatilgængeligheden, hverken på enkeltstofniveau eller i den samlede database.

Output fra databasen er en PDF-fil, der uden problemer kan læses på skærmen eller printes ud. PDF-filer for samtlige 2.605 stoffer er lagret på CD-ROM'en og udgør sammen med den overordnede data indholdet i den kommercielle IUCLID-version. I PDF-filen gengives samtlige de ikke-

fortrolige oplysninger, der er rapporteret til IUCLID, hvilket indebærer at der for mange stoffer/tests er en del redundans. Det medfører imidlertid også, at det gennem PDF-filen er muligt at få et relativt hurtigt overblik over samtlige tests.

Hvert kapitel og underkapitel er forsynet med en række underoverskrifter, der giver mulighed for en første vurdering af datakvalitet og resultat af de enkelt tests. Det er uden for forprojektets rammer at give en detaljeret beskrivelse af alle overskrifter, men til illustration gives et par eksempler, der alle vedrører formaldehyd.

Box 1. Eksempel på information i kapitel 1.6.1 i IUCLID, "Labelling"

<p><b>1.6.1 Labelling</b>  <b>Labelling:</b> as in Directive 67/548/EEC  <b>Symbols:</b> T  <b>Nota:</b> B  D  <b>Specific limits:</b> yes  <b>R-Phrases:</b>  (23/24/25) Toxic by inhalation, in contact with skin and if swallowed  (34) Causes burns  (40) Possible risks of irreversible effects  (43) May cause sensitization by skin contact  <b>S-Phrases:</b>  (1/2) Keep locked up and out of reach of children  (26) In case of contact with eyes, rinse immediately with plenty of water and seek medical advice  (36/37/39) Wear suitable protective clothing, gloves and eye/face protection  (45) In case of accident or if you feel unwell, seek medical advice immediately (show the label where possible)  (51) Use only in well-ventilated areas</p>
--

Box 2. Eksempel på information i kapitel 2.5 i IUCLID, "Partition coefficient".

<p><b>2.5 Partition Coefficient</b>  <b>log Pow:</b> = 0  <b>Method:</b> other (calculated)  <b>Year:</b>  <b>Source:</b> BASF AG Ludwigshafen  <b>Reliability:</b> (2) valid with restrictions  Competent author</p>	(50)
<p><b>log Pow:</b> ca. .35  <b>Method:</b> other (measured)  <b>Year:</b> 1995  <b>GLP:</b> no data  <b>Source:</b> ALDER S.p.A. TRIESTE</p>	(51)

Box 3. . Eksempel på information i kapitel 4.1 i IUCLID, "Acute/prolonged toxicity to fish".

<p><b>4.1 Acute/Prolonged Toxicity to Fish</b> <b>Type:</b> flow through <b>Species:</b> Cyprinus carpio (Fish, fresh water) <b>Exposure period:</b> 2 hour(s) <b>Unit:</b> mg/l <b>Analytical monitoring:</b> no data <b>LC50:</b> = 74 <b>Method:</b> other: acute toxicity test; "flow through bioassay" <b>Year:</b> <b>GLP:</b> no data <b>Test substance:</b> other TS <b>Remark:</b> Reliability: 2 (reliable with restrictions) <b>Source:</b> BASF AG Ludwigshafen <b>Test substance:</b> formaldehyde; no data on purity of the compound</p>
--

( 90 )

De tre eksempler indikerer, at en stor del af de oplysninger, der er nødvendige for at vurdere datakvaliteten er til stede i IUCLID, om end i summarisk form. I tvivlstilfælde er det som regel muligt at finde frem til den originale reference og på denne måde få underbygget sin vurdering.

### 3.1.4 Udtræk og eksport af data fra IUCLID

Den databasestruktur, der anvendes i den kommercielle udgave af IUCLID, giver ikke mulighed for at udtrække data på tværs af enkeltstoffer, ej heller at lave statistik på indholdet af data. Den eneste eksportmulighed er i form af PDF- eller RTF-filer, hvor mulighederne for viderebehandling i andet end tekstbehandlingsprogrammer stort set ikke er til stede.

Anvendelse af den store datamængde i IUCLID kræver derfor, at en specialist i toksikologiske og økotoksikologiske vurderinger kan viderebearbejde informationerne, hvis de skal anvendes til andet formål, f.eks. integreres i UMIP.

### 3.1.5 QSAR i IUCLID

Med de søgemuligheder, der er skitseret i de ovenstående afsnit, er det ikke muligt at vurdere, hvor stor en del af data i IUCLID, der er etableret ved hjælp af QSAR.

IUCLID er i princippet åben for enhver relevant information om fysisk-kemiske egenskaber såvel som toksikologiske og økotoksikologiske tests. Det er endvidere en grundlæggende antagelse ved risikovurdering efter EUSES-modellen (European Union System for Evaluation of Substances (TSA Group Delft (1997))), at estimerede data (f.eks. ved hjælp af QSAR) er bedre end default-værdier. QSAR kan derfor medvirke til en mere sikker risikovurdering i mangel af andre data, men det er oplagt, at hvis der findes målte værdier efter anerkendte målemetoder, vil disse have første prioritet.



## 3.2 EURAM-metoden

### 3.2.1 Introduktion

EURAM (EU Risk Ranking Method) er et vigtigt element i EU's 4-trins procedure for vurdering af eksisterende kemikalier (Hansen *et al.*, 1999). De fire trin er:

- Dataindsamling, hvor eksisterende data er samlet og dokumenteret i IUCLID-databasen
- Prioritering af kemikalier, som er det trin, hvor EURAM benyttes
- Risikovurdering, og
- Risikonedsettelse (hvis nødvendigt)

EURAM kan beskrives som en forholdsvis simpel prioriteringsmetode, hvor der er foretaget en afbalancering af tidsbesparende, automatiserede (objektive) procedurer med en vis indbygget usikkerhed, og tidskrævende og subjektive ekspertvurderinger, der generelt må formodes at være mere præcise.

Balancen opnås ved at have følgende elementer med i prioriteringen (EU 1999 a,b,c):

- Udtræk af data fra IUCLID til brug ved rankingmetoden
- Ranking af IUCLID-kemikalier ved hjælp af den automatiserede procedure
- Ekspertvurdering af resultaterne og udarbejdelse af et forslag til prioriteringsliste

Mere simpelt kan man sige, at det eksisterende datamateriale anvendes i en numerisk beregningsmodel, der tager hensyn til datamangler og usikkerheder. Resultatet – en score for hvert kemikalie – vurderes derefter af en ekspert(gruppe), der bruger deres erfaring til en yderligere nuancering eller præcisering.

Ved at gennemføre EURAM-rankingen opnås en fælles reference og fokus for den diskussion, der skal munde ud i generelle prioriteringslister. Det skal understreges, at EURAM-rankingen ikke er en risikovurdering, men er et værktøj, der med udgangspunkt i de store datamængder i IUCLID-databasen kan anvendes til at identificere og prioritere de stoffer, der udgør den største potentielle risiko for mennesker og miljø, og som derfor bør underkastes en detaljeret risikovurdering.

EURAM ranker kemikalierne på baggrund af deres potentielle risiko for mennesker og miljø gennem brug af to simple modeller for eksponering/effekt.

Til beregning af miljøscoren bruges værdier for PEC (Predicted Environmental Concentration) og PNEC (Predicted No-Effect Concentration). Begge værdier beregnes efter simple metoder, der er i overensstemmelse med EU's metode til risikovurdering, der er beskrevet i det såkaldte Technical Guidance Document, TGD (EU, 1996).

TGD-dokumentet identificerer fem områder, der skal beskyttes gennem en risikovurdering, nemlig akvatiske økosystemer, terrestriske økosystemer,

topkonsumenter, mikroorganismer i renseanlæg og atmosfæren. På grund af det lave antal effektdata for ikke-akvatiske økosystemer (og dermed også et større behov for ekspertvurdering af de få eksisterende data), er rankingen som udgangspunkt baseret på den potentielle risiko for akvatiske økosystemer. For de andre beskyttelsesområder producerer EURAM ganske vist en score, men denne kan kun bruges til at ændre rankingen efter en ekspertvurdering af scoren og de bagvedliggende data.

Til beregning af humanscoren benyttes et endnu mere simpelt system, der er baseret på de vigtigste parametre til beregning af både eksponering og potentiel effekt. På grund af de mange end-points i human toksikologi har ekspertgruppen bag EURAM-metoden vurderet, at det ikke er muligt at etablere en NOAEL (No Observable Adverse Effect Level) på samme måde, som det gøres for miljøeffekterne. I stedet anvendes IUCLID-databasens oplysninger om hvilke risikosætninger (R-sætninger), der er relevante for et givet kemikalie samt oplysninger om, hvilke mutagen- og reproduktionstests, der er gennemført – og med hvilket resultat.

Humanscoren tager således hensyn til de effekttyper, som EU's forordning kræver inddraget i en risikovurdering: akut toksicitet, irritation, ætsning, sensibilisering, toksicitet ved gentagne doser, mutagenicitet, carcinogenicitet og reproduktionstoksicitet. Metoden tager hensyn til de befolkningsgrupper, der er direkte udsat for stofferne, d.v.s. arbejdstagere og forbrugere, mens udsættelse af den almindelige befolkning vurderes at være for kompleks til en ranking metode og er derfor ikke inkluderet i EURAM.

### 3.2.2 Miljøscore og ranking

#### 3.2.2.1 Eksponering

Miljøets eksponering for kemikalier beregnes ved hjælp af en simpel model, der tager hensyn til tre faktorer:

- Emissioner, baseret på producerede/importerede mængder og brugsmønstre
- Distribution i miljøet, baseret på en Mackay Level 1-model
- Bionedbrydelighed, baseret på nedbrydning i vandige modeller

I relation til LCA er det især de to sidstnævnte faktorer, der er af interesse, idet emissioner i en LCA beregnes og dokumenteres for specifikke processer, produkter og produktsystemer i form af et *inventory*. For en god ordens skyld skal det dog nævnes, at emissionen i EURAM beregnes ved at vurdere, hvor stor en del af produktionen, der anvendes i henholdsvis lukkede systemer, indesluttet i en form for matrix, ikke-spredende processer ("nondispersive use") og spredende processer ("dispersive use") og multiplicere disse andele med en default-værdi for, hvor meget der antages at blive udledt til miljøet. Default-værdien for de fire andele er henholdsvis 0,01, 0,1, 0,2 og 1. Hvis der ikke er kendskab til anvendelsesmønstret, anvendes en default-værdi på 1, d.v.s. at det antages, at hele produktionen af det pågældende stof ender i miljøet.

*Distributionen* i miljøet beregnes for seks delmiljøer (*compartments*), i.e. luft, vand, jord, sediment, suspenderede faste stoffer og fisk (biota). I beregningen anvendes default-værdier for volumen, dybde, areal, andel af organisk kulstof og vægtfylde for hver af de seks delmiljøer. Disse oplysninger suppleres med værdier for kemikaliernes vandopløselighed, damptryk, fordelingsforhold

mellem octanol og vand og lipid-indhold i fisk, hvorefter en automatisk beregning kan gennemføres, eventuelt efter enkelte mellemregninger.

*Bionedbrydelighed* i miljøet indgår i beregningerne gennem oplysninger fra OECD-tests om stofferne er potentielt ("*inherent*") eller let ("*ready*") nedbrydelige. Hvis disse oplysninger mangler, antages det som defaultværdi, at stofferne er ikke-nedbrydelige ("*persistent*"). Der anvendes således kun fire værdier i beregningerne, alt efter testresultaterne:

Tabel 4. Fraktion og procent af et udledt stof, der nedbrydes i vandmiljøet.

Bionedbrydelighed	Tilbagebleven fraktion	% nedbrudt
Let ( <i>ready</i> ) bionedbrydeligt	0,1	90
Potentielt ( <i>Inherent</i> ) bionedbrydeligt	0,5	50
Ikke-bionedbrydeligt ( <i>persistent</i> )	1	0
Default	1	0

Værdierne for de tilbageblevne fraktioner er i en vis grad arbitrære. Årsagen til dette er ønsket om at indsnævre spændvidden for mulig nedbrydning (intervalskalering) og samtidigt bevare tilstrækkelig afstand mellem de mulige scoreværdier.

### 3.2.2.2 Samlet score for eksponering af miljøet

Den samlede eksponering i de enkelte delmiljøer beregnes ved hjælp af en formel, hvori indgår værdier for emission, distribution og nedbrydelighed. For de fire delmiljøer vand, luft, jord og sediment anvendes de rå data for eksponering af vandige miljøer, der efterfølgende skaleres til værdier mellem 0 og 10 gennem at anvende logaritmiske udtryk i beregningen:

$$\text{Eksponeringsscore} = 1.37[\log(\text{emission} * \text{distribution} * \text{bionedbrydning}) + 1.301]$$

For delmiljøet fisk anvendes den følgende formel::

$$\text{Eksponeringsscore} = 0.971[\log(\text{emission} * \text{distribution} * \text{bionedbrydning})_{\text{jord}} + \text{AP} + 1.301]$$

Der kan ikke opstilles et generelt billede af, hvad der bidrager mest i den samlede eksponeringsvurdering i EURAM. Der kan dog tegnes et groft billede af nogle enkeltfaktorer, der ofte er af betydning.

### 3.2.2.3 Emission

I beregningen af emissionen indgår to hovedelementer, nemlig den producerede/importerede mængde og den fraktion, der udledes ved hovedanvendelsen af stoffet. Den producerede/importerede mængde er mindst 1.000 tons (der er alene tale om HPVC) og højst 1.000.000 tons (max. default værdi). De fraktioner, der udledes til miljøet, ligger i ranking-metoden mellem 0.01 (lukkede systemer) og 1 (wide dispersive use). Emissionsfaktoren bliver således et sted mellem 10 og 1.000.000, en faktor 100.000 til forskel. Et eksempel på den højeste emissionsscore kan tænkes at være vaskeaktive stoffer, der produceres i stor mængde og som i overvejende grad udledes til miljøet.

### 3.2.2.4 Distribution.

Distributionsfaktoren er mere vanskelig at sætte størrelse på. For det primære delmiljø i ranking-metoden, vand, er fugacitetskapaciteten, Z, bestemt ved formelen  $Z = C/VP$ , hvor C er vandopløseligheden og VP er damptrykket.

Stoffer med en høj opløselighed og et lavt damptryk vil således have tendens til at blive fundet i vandmiljøet og dermed opnå en høj værdi for distribution til dette miljø. Minimumsværdien for Z er som default sat til 0,01, d.v.s. at der under alle omstændigheder vil blive regnet med, at en del af stoffet kan genfindes i vandfasen. Maksimumsværdien må antages at være tæt på 100, hvilket giver en potentiel forskel på en faktor 10.000. I den ekspertvurdering, der følger efter EURAM-screeningen er det dog muligt at inddrage andre delmiljøer end vand i den endelige prioritering. Herved kan der tages hensyn til, at ikke alle stoffer har deres primære effekt i vandmiljøet.

### 3.2.2.5 Bionedbrydelighed

Bionedbrydelighed er den tredje faktor ved beregning af eksponeringen. Let nedbrydelige stoffer tildeles en faktor 0,1, mens persistente stoffer – og stoffer hvor man ikke kender nedbrydeligheden – tildeles en faktor 1. For dette element i emissionsberegningen er den størst mulige forskel således en faktor 10.

### 3.2.3 Scoring af miljøeffekter

Beregning af effektscoren i de enkelte delmiljøer kræver flere trin. Som det første identificeres de data, der findes for akutte og kroniske tests for forskellige arter. Hvis værdier for kronisk NOEC er tilgængelige, bruges den laveste af disse, og der ses bort fra akut-data. Hvis kroniske NOEC-data ikke er tilgængelige, anvendes den laveste værdi fra akut-data (enten NOEC eller L(E)C50), hvorfor der suppleres med en vurderingsfaktor mellem 10 og 1000 efter de følgende retningslinier:

Tabel 5. Vurderingsfaktorer ved beregning af akvatiske og terrestriske effektscore.

Akvatisk og terrestrisk effektscore		
Endpoint	Antal arter	Vurderingsfaktor
NOEC	≥ 3	10
NOEC	2	50
NOEC	1	100
L(E)C50	≥ 3	1000
L(E)C50	2	1000
L(E)C50	1	1000

Tabel 6. Vurderingsfaktorer til beregning af effektscore for mikroorganismer i rensningsanlæg.

Effektscore for mikroorganismer i rensningsanlæg		
Endpoint	Antal arter	Vurderingsfaktor
NOEC or EC10	≥ 3	10
NOEC or EC10	2	10
NOEC or EC10	1	10
EC50	≥ 3	100
EC50	2	100
EC50	1	100

#### 3.2.3.1 Samlet effektscore

Effektfaktoren beregnes som den laveste rapporterede forsøgsværdi, divideret med vurderingsfaktoren. For at begrænse spændvidden i de mulige resultater afgrænses værdier under 10 ng/L for vand og mikroorganismer eller 10 ng/kg tør jord for terrestriske organismer, og over 1 mg/L eller 1 mg/kg tør jord. Endelig normaliseres effektscoren til at være mellem 0 og 10 gennem at tage titallogaritmen til værdien. For vand, jord og rensningsanlæg. For topkonsumenter beregnes effektfaktoren ud fra kemikaliet's risikosætninger vedrørende toksicitet overfor gentagne doser, mutagenicitet og

reproduktionstoksicitet (R46, R40, R47, R60, R61, R63, R64, R48 (giftig) og R48 (skadelig). Hvis ingen af disse risikosætninger er tildelt det pågældende stof, er effektfaktoren lig med nul for topkonsumenter.

### 3.2.4 Kombineret eksponerings- og effektscore

Afslutningsvis multipliceres eksponerings- og effektscoren med hinanden for at give den samlede score med hensyn til potentielle miljøeffekter. Eftersom både eksponerings- og effektscoren hver for sig ligger mellem 0 og 10, er den samlede score for hvert stof et tal mellem 0 og 100.

Scoren for delmiljø "vand" kan bruges direkte i en ranking, mens den for andre delmiljøer (rensingsanlæg, jord og fisk) ikke er egnet til en automatisk ranking. Scoren i disse delmiljøer kan dog bruges senere til at justere eller erstatte scoren i delmiljø vand.

Bioakkumulering (BCF) indgår ikke i beregningen af effektscoren for vand, men da der ofte er tilgængelige værdier, foreslås det at forbedre scoren gennem at reducere den oprindelige score med 30% og derefter tillægge potentialet for akkumulering efter den følgende skala:

Tabel 7. EURAM-beregningsværdier for akkumuleringspotentiale som funktion af biokoncentreringsfaktoren.

Log (BCF)	Potentiale for akkumulering (AP)
Log (BCF) ≤ 2	0
2 < log /BCF ≤ 3	1
3 < log (BCF) ≤ 4	2
4 < log (BCF)	3
Default	3

Ligningen for den forbedrede score ser ud som følger:

$$\text{Akvatisk effektscore} = 0.7 * \text{effektscore}_{\text{vand}} + AP$$

Vægtningen af de to faktorer i udtrykket er ikke videnskabeligt baseret, men afspejler den politiske relevans af de to faktorer toksicitet og persistens ved fastsættelsen af behovet for nedsættelse af risici.

### 3.2.5 Opsummering – miljøeffektscore

Scoren for potentielle miljøeffekter er et produkt af en score for eksponering og en score for potentiel effekt. Der kan beregnes en score for seks delmiljøer, hvor scoren for vandmiljø må betegnes som den vigtigste, idet det er her, hovedparten af alle tilgængelige data findes, specielt på effektsiden.

Følgende data indgår i beregningerne:

- Vandopløselighed
- Damptryk
- Lipidindhold i fisk
- Fordelingsforhold octanol/vand
  
- NOEC
- L(E)C50
- EC10
- EC50

- (BCF)

Scoren for både eksponering og effekt ligger mellem 0 og 10, hvorfor deres produkt ligger mellem 0 og 100. Et dårligt datagrundlag, f.eks. at der kun findes akuttests på en enkelt art, "straffes" med en vurderingsfaktor, der ligger mellem 10 og 1000. Da scoren imidlertid normaliseres til at ligge mellem 0 og 10 ved hjælp af logaritmer, svarer dette til maksimalt 30 point.

### 3.2.6 Automatiseret dataudvælgelse til brug i EURAM

Samspelet mellem IUCLID og EURAM kommer bedst til udtryk i den automatiske udvælgelse af data til brug ved rankingen.

IUCLID er bygget op, så den består af en række descriptorer, kvalitative udsagn, og en række værdier. For at kunne udnytte disse i EURAM er der lavet en automatiseret udtræksprocedure, der udvælger de bedste data til brug ved rankingen.

I udvælgelsen er der to faktorer, som der er speciel opmærksomhed om, nemlig udvælgelsen af data som beskrevet i Technical Guidance Document (TGD) og håndtering af inhomogene data for forskellige stoffer med hensyn til kvalitet og kvantitet.

### 3.2.7 Inddeling i preferenceklasser efter TGD

Overordnet set skal EURAM i henhold til til Technical Guidance Document (TGD) først afvise de data, der ikke er valide på grund af invalide testbetingelser eller dårligt rapporterede testresultater. Derefter skal der gives større vægt til de data, der er fremkommet ved undersøgelser, der følger accepterede testmetoder, f.eks. EU, OECD eller andre standardiserede organer, og er Good Laboratory Practice. Endelig skal der gives preference til konsoliderede data, d.v.s HEDSET- data (Harmonised Electronic Data set), der er genereret af to eller flere samarbejdende virksomheder.

Med dette udgangspunkt sorterer EURAM data efter følgende kriterier:

1. Den anvendte testmetode
2. Testresultater fremkommet ved GLP
3. Konsoliderede data

Data for et specifikt stof og endpoint kan på denne måde deles ind i tre kategorier med i alt 8 preferenceklasser:

Tabel 8. Skematisk overblik over inddelingen i otte preferenceklasser efter TGD-kriterier.

Foretrukne test resultater				Acceptable test resultater				Ikke-acceptable test resultater	
Konsoliderede data		Ikke-konsoliderede data		Konsoliderede data		Ikke-konsoliderede data			
GLP	Ikke GLP	GLP	Ikke GLP	GLP	Ikke GLP	GLP	Ikke GLP		
I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII		

I rankingproceduren udvælges den højeste preferenceklasse (I er højest) for hvert endpoint til videre behandling.

Det skal bemærkes, at der ikke i IUCLID eller HEDSET er allokeret descriptorer ("glossary codes") til alle accepterede metoder, og forsøg efter disse vil derfor ikke blive inkluderet under de foretrukne testresultater. I den samlede EURAM-ranking metode tages der højde for dette i en efterfølgende ekspertvurdering. Estimerede data for  $\log K_{ow}$  og damptryk kan lægges direkte ind i HEDSET/IUCLID, og QSAR-baserede estimater kan anvendes hvis der ikke er målte værdier i IUCLID. Brug af QSAR-estimater markeres i ranking-resultaterne med et flag, der indikerer at datakvaliteten ikke er den bedste.

#### 3.2.7.1 Håndtering af inhomogene datasæt

Kvaliteten og kvantiteten af data i IUCLID varierer betragteligt fra stof til stof. For at håndtere dette er det overordnede princip, at de mest konservative værdier fra den højeste præferenceklasse udvælges og anvendes i rankingen.

De mest konservative værdier er i denne henseende de værdier, der i selve beregningsproceduren vil medføre de mest belastende resultater for et givet stof og endpoint.. I praksis udvælges de mest konservative værdier efter følgende retningslinier:

- For kogepunkt, damptryk og  $K_{ow}$  anvendes de laveste værdier
- For vandopløselighed anvendes den højeste værdi
- For bionedbrydning anvendes den descriptor (enten readily biodegradable, Inherent biodegradable eller nonbiodegradable), der giver den laveste fraktion af nedbrudt stof efter Tabel 4. En undtagelse er, hvis der kun i den højeste preferenceklasse kun findes descriptorer for readily eller inherent biodegradable, idet sådanne stoffer betragtes som readily biodegradable. Hvis der ikke findes nogen descriptorer, beregnes bionedbrydeligheden på baggrund af BOD/COD forholdet
- For bioakkumulation anvendes målte værdier for BCF, hvis de er til stede. Hvis ikke, anvendes den højeste  $\log K_{ow}$ . Dette anses ikke som en QSAR-værdi, fordi brug af en implicit QSAR-værdi ( $\log(BCF) = -1.0 + \log K_{ow}$ ) er konsistent med Direktiv 67/548 (CEC, 1967) om klassificering og mærkning af stoffer.
- For akvatisk toksicitet anvendes de laveste værdier for seks endpoints, der er udvalgt i henhold til TGD for at opnå sammenlignelige test data. Mange resultater er ikke fremkommet gennem en standardiseret test med hensyn til varighed eller effekt, men kan alligevel anvendes efter fastsatte kriterier, der gengives i van Haelst, 2000. Det skal dog bemærkes, at der tilsyneladende er en fejl i gennemgangen af kriterierne i denne reference, ligesom der er uklarheder omkring den endelige prioritering af tests. Dette skal naturligvis afklares, hvis EURAMs automatiske udvælgelsesprocedure skal anvendes i anden sammenhæng.

#### 3.2.7.2 Validering af dataudvælgelseskriterier

Den automatiserede dataudvælgelsesprocedure i EURAM er blevet sammenlignet med resultatet af en ekspert-baseret udvælgelse, der er blevet foretaget i forbindelse med EU og OECD risikovurderinger af en række stoffer. Sammenligningen omfatter data for kogepunkt, damptryk,  $\log K_{ow}$ , vandopløselighed, bioakkumulering samt akut og kronisk toksicitet overfor fisk, Daphnia og alger. Sammenligningen omfatter også den resulterende PNEC-værdi.

En regressionsanalyse af de to udvalgte datasæt viser en god overensstemmelse mellem de to datasæt, som det fremgår af den nedenstående tabel.

Tabel 9. Resultater af en regressionsanalyse på data udvalgt af eksperter og data udvalgt af den automatiserede EURAM-procedure.

Endpoint	$r^2$	ser	n	Skæringspunkt	Hældning
Log kogepunkt	0,978	0,039	54	0,044	0,980
Log damptryk	0,940	0,652	40	0,009	0,981
log $K_{ow}$	0,970	0,354	50	0,051	1,052
log opløselighed	0,879	0,695	41	0,148	0,908
log BCF	0,711	0,712	31	0,231	0,769
log LC50 fisk	0,785	0,546	57	0,035	0,915
Log LC50 Daphnia	0,897	0,377	54	0,121	0,936
Log LC50 alger	0,974	0,243	20	-0,169	1,069
Log NOEC Daphnia	0,656	0,696	12	-0,256	0,756
Log NOEC alger	0,915	0,555	9	-0,390	1,071
PNEC	0,894	0,472	30	-0,086	0,957

$r^2$  = square correlation coefficient; ser = standard error of regression; n = number of chemicals.

Data, der er fremkommet ved brug af QSAR eller ved anvendelse af default-værdier, er ikke omfattet af regressionsanalysen. Heller ikke for NOEC af fisk, hvor der kun var fire datasæt til rådighed.

Den dårligste korrelation ses for biokoncentreringsfaktoren, BCF. En af årsagerne til dette kan være, at databasen indeholder store mængder data for denne parameter. Disse data kan tilhøre forskellige preferenceklasser, og derved øges antallet af muligheder for valg i den automatiserede procedure.

To ud af tre datasæt for akut akvatisk toksicitet, nemlig L(E)C50 for Daphnia og alger viser en god korrelation, mens korrelationen for de kroniske toksicitetsdata kun karakteriseres som moderat. Årsagen til den moderate korrelation er, at det kun er en begrænset mængde af datasæt, der er blevet korreleret.

### 3.2.8 Brug af QSAR i EURAM

Resultatet af ranking-proceduren i EURAM er dokumenteret i to regnearksfiler, der ikke er offentligt tilgængelige, og derfor heller ikke har kunnet anvendes i dette forprojekt.

I regnearkene ordnes stofferne efter datatilgængelighed. Formålet med dette er at sikre en sammenlignelig ranking med udgangspunkt i at de underliggende databaser på stofniveau er sammenlignelige med hensyn til datakvalitet og -mængde.

For at klassificere stofferne som "datarige" eller "datafattige" (med eller uden brug af QSAR) er følgende regler/retningslinier blevet opstillet (ECB 4/01/99):

Tabel 10. Kriterier for miljøklassificering

	Mackay I	Mackay I med QSAR	Ikke fuld Mackay I
akvatisk toksicitetstest	rig	rig med QSAR	fattig
QSAR	rig med QSAR	rig med QSAR	fattig med QSAR
Ingen data	fattig	fattig med QSAR	Ingen data

Det fremgår ikke af referencen, hvordan denne klassificering af stofferne udnyttes i den praktiske ranking. Det fremgår implicit af andre dokumenter om EURAM, at informationer om brugen af blandt andet QSAR indgår i den



ekspertvurdering, der efterfølger den automatiserede ranking. Tabellen kan være et vigtigt input til denne vurdering.

### 3.2.9 Relation til UMIP

Stoffernes fordeling og skæbne i miljøet beregnes på to forskellige måder, ligesom der ikke er sammenfald mellem de datakrav, der stilles til eksponeringsvurdering i UMIP og EURAM. Alligevel er der en del sammenfald i de samlede metoder, således som det fremgår af nedenstående.

#### 3.2.9.1 Metodiske forskelle

En væsentlig forskel mellem de to metoder er, at bionedbrydelighed indgår i eksponeringsvurderingen i EURAM, mens det er en del af effektvurderingen i UMIP. Endvidere er vurderingsfaktoren forskellig i de to metoder. Mere præcist vil et let-nedbrydeligt stof ifølge EURAM-metoden ikke være tilstede i miljøet i samme grad (en faktor 10 mindre) som et persistent stof, der er udledt i samme mængde, mens det let-nedbrydelige stof i UMIP vil have en mindre effekt på miljøet (en faktor 5 mindre) end et persistent stof. Det er dog under alle omstændigheder et åbent spørgsmål, om en faktor 5 eller en faktor 10 er tilstrækkeligt til at afspejle forskellen mellem let-nedbrydelige og persistente stoffer med hensyn til deres potentiale for miljøeffekter. Da den tilbageværende fraktion ikke kan blive større end 1, der er default-værdien i både EURAM og UMIP, må gradueringen nødvendigvis ændres gennem at sætte restfraktionen af let-nedbrydelige stoffer lavere (f.eks. 0,01 eller 0,001), eller at søge en udvej til at graduere nedbrydeligheden af de let-nedbrydelige stoffer i et interval mellem f.eks. 0,1 og 0,001.

Overordnet vurderes det, at UMIP's beregningsmodel for eksponering af delmiljøerne er operationel i forhold til datatilgængelighed, idet der i UMIP kun stilles krav til oplysninger om Henry's lov konstant og stoffernes levetid i atmosfæren. Begge oplysninger er tilgængelige for mange stoffer og denne del af vurderingen er således ikke en flaskehals.

Med hensyn til beregning af en økotoksicitetsfaktor er der et stort sammenfald mellem både datakrav og vurderingsmetode. I begge metoder er det bærende element at vurderingen foretages på baggrund af PEC/PNEC-forholdet, og at toksicitet overfor akvatiske organismer er den vigtigste faktor.

En væsentlig forskel mellem de to metoder ligger i anvendelsen af en vurderingsfaktor, der kompenserer for manglende viden, f.eks. i form af manglende kroniske tests eller tests på flere arter. I UMIP slår denne vurderingsfaktor, der ligger mellem 10 og 1000, fuldt igennem ved fastsættelse af den endelige faktor for økotoksicitet, mens der i EURAM benyttes logaritmen til vurderingsfaktoren, d.v.s. en værdi mellem 1 og 3. Denne værdi multipliceres efterfølgende med eksponeringsscoren, og kan derved maksimalt give 30 point på en skala fra 0 til 100.

Når det tages i betragtning, at de to metoder er udarbejdet til vidt forskellige formål, kan der ikke umiddelbart peges på metodeelementer, der udnyttes mere hensigtsmæssigt i den ene metode end i den anden. Forsigtighedsprincippet, som blandt kommer til udtryk i den nævnte vurderingsfaktor, har sin naturlige plads i begge metoder. Det er imidlertid klart, at faktorer i denne størrelsesorden kommer til at spille en væsentlig rolle i UMIP-metoden, specielt fordi den multipliceres med en værdi for emissionen af det pågældende stof. Denne værdi kan i visse tilfælde også være

behæftet med en stor usikkerhed, og bidraget til akvatisk toksicitet fra et enkelt stof kan derfor være fejlvurderet med en faktor 10.000 eller mere.

Hvis denne usikkerhed skal reduceres, ligger den væsentligste mulighed i en revurdering af vurderingsfaktoren. Hovedspørgsmålet er, om det er nødvendigt eller hensigtsmæssigt med så store faktorer i en LCA-vurdering. Det er klart, at forsigtighedsprincippet er væsentligt, men i en LCA-vurdering af økotoksicitet er der i realiteten tale om måske flere hundrede "mini-risikovurderinger" eller rankinger. Når resultaterne fra en LCA analyseres mere grundigt viser det sig med jævne mellemrum, at væsentlige bidrag kommer fra stoffer, der ud fra kvalitative overvejelser og eksperter erfaringer ikke udgør en stor belastning. Det er imidlertid nødvendigt at foretage denne vurdering i hvert enkelt tilfælde. Dette er tidskrævende og medfører, at fokus fjernes fra de bidrag, som både er reelle og som der er mulighed for at reducere.

En måde at undgå dette på, er ved at udvælge en række prioriterede stoffer, der indgår i et specielt index. De prioriterede stoffer kan for eksempel være alle de stoffer og stofgrupper, der bidrager signifikant til normaliseringsreferencen for de enkelte effektkategorier. Mange af disse stoffer vil ikke være at finde i IUCLID fordi de ikke er HPVC, men deres effektpotentiale er velkendt og kan beregnes med forholdsvis lille usikkerhed. En anden mulighed er at udarbejde et index, hvori der indgår specielt udvalgte stoffer, f.eks. POP'er og/eller stoffer, der er optaget på en eller flere lister.

Som supplement til det "specielle" index kan beregnes et index, der omfatter alle andre bidrag. Dette index vil kunne opfange og vise signifikante bidrag fra en given aktivitet i livsforløbet, simpelthen fordi stofferne kun forekommer i et enkelt index. Dette gør det lidt nemmere at undersøge, om det signifikante bidrag skyldes manglende viden om stoffets effektpotentiale (og dermed en høj vurderingsfaktor), eller om der er tale om procesrelaterede udledninger af stoffer med et velkendt effektpotentiale. I det første tilfælde kan der arbejdes på at "formindske" effektpotentialet gennem en bedre dokumentation. I det andet tilfælde bør et stort effektpotentiale give anledning til overvejelser om, hvordan udledningerne kan reduceres, eller om der kan substitueres til et stof med et mindre effektpotentiale.

Ved at dele de eksisterende effektkategorier op i to index'er opnås det således, at det er muligt at få en mere sikker vurdering af et produkts bidrag til human toksicitet og økotoksicitet via de stoffer, der har både politisk og miljøfaglig fokus. Endvidere opnås det, at procesrelaterede emissioner ikke "drukner" i bidragene fra energirelaterede emissioner. Derved får virksomhederne bedre mulighed for at vurdere hvilke aktiviteter, der er mest belastende og dermed også bedre mulighed for at iværksætte foranstaltninger, der nedsætter denne belastning.

### *3.2.9.2 Brug af data fra IUCLID*

En anden mulighed, der kan udnyttes, er de mange data i IUCLID-databasen, specielt indholdet af toksicitetstests. Omfang af data er nærmere beskrevet under gennemgangen af IUCLID. Det skal nævnes her, at der i IUCLID findes kroniske toksicitetsdata for henholdsvis 13,7% (fisk) og 17,8% (krebsdyr) af stofferne i databasen. I relation til UMIP betyder dette, at vurderingsfaktoren maksimalt er 20. I IUCLID findes der endvidere akutte

toksicitetsdata for henholdsvis 68% (fisk), 55% (krebsdyr) og 45% (alger) af stofferne. Dette giver i UMIP en maksimal vurderingsfaktor på 100.

### 3.3 UMIP, IUCLID og EURAM

I dette afsnit sammenlignes metoder og datakrav og -indhold i UMIP, IUCLID og EURAM. Der er således en naturlig gentagelse af nogle af de oplysninger, der allerede er givet under gennemgangen af IUCLID og EURAM.

#### 3.3.1 Introduktion til UMIP

Hovedprincippet i UMIPs LCA-metode til vurdering af økotoksicitet er, at alle bidrag gennem hele livscyklus beregnes og summeres for fire delmiljøer/effekttyper: vand (akut og kronisk økotoksicitet), jord (kronisk) og renseanlæg:

$$MP(\phi tc) = \sum_{i=1}^n EF(\phi tc)_i * Q_i \quad (1)$$

Hovedprincippet i UMIPs LCA-metode til vurdering af human toksicitet følger de samme grundprincipper som vurderingen af økotoksicitet. For udledninger betragtes potentielle bidrag til toksicitet ved eksponering af mennesker for følgende delmiljøer:

- luft (ved indånding)
- overfladevand (ved indtagelse af fisk og skaldyr)
- jord (ved direkte indtagelse samt ved indtagelse af grønt, kød eller mælkeprodukter fra organismer eksponeret for jorden)
- grundvand (ved direkte indtagelse)

For det samlede livsforløb fremkommer toksicitetspotentialt for delmiljø c, (MP(htc), som summen af toksicitetspotentialer for samtlige udledte stoffer:

$$MP(htc) = \sum_{i=1}^n EF(htc)_i * Q_i \quad (2)$$

Sagt med mere almindelige ord sker vurderingen for hvert delmiljø/effekttype gennem at gange den mængde af et givet stof, der udledes i en given aktivitet med stoffets effektfaktor,  $EF(\phi tc)_i$  eller  $EF(htc)_i$  for forskellige delmiljøer. Slutresultatet fås ved at summere alle bidrag for enkeltstoffer indenfor hver effekttype.

Den samlede UMIP-metode er beskrevet både på dansk og engelsk (Hauschild (ed), 1996, Hauschild & Wenzel, 1998).

#### 3.3.2 Introduktion til IUCLID

IUCLID er en omfattende database med kemikalieoplysninger. Oplysningerne er blevet indsamlet på en struktureret måde gennem en forpligtelse for producenter og importører af High Production Volume Chemicals (HPVC), d.v.s. kemikalier, der importeres eller produceres i mængder over 1000 tons

om året. Endvidere indeholder databasen et mindre datasæt for kemikalier, der produceres/importeres i mængder mellem 10 og 1000 tons om året, de såkaldte Low Production Volume Chemicals (LPVC).

Databasen er et centralt europæisk værktøj til at indsamle og videregive information om eksisterende kemikalier til myndigheder, incl. EU-Kommisionen, industri, interesseorganisationer og den almindelige offentlighed.

De data, der skal rapporteres af de enkelte producenter/importører til Kommissionen vedrørende HPVC og LPVC, inkluderer:

- Stofnavn
- Producerede/importerede mængder
- Information om klassificering og mærkning i relation til Direktiv 67/548
- Et rimelig skøn over brugsmønstre

Endvidere skal følgende data rapporteres for HPVC:

- Fysisk-kemiske egenskaber
- Information om stoffernes fordeling og skæbne i miljøet
- Toksikologiske og økotoxikologiske egenskaber

Indholdet i IUCLID er beskrevet mere detaljeret i afsnit 3.1.

### 3.3.3 Introduktion til EURAM

EURAM (EU Risk Ranking Method) er et vigtigt element i EU's 4-trins procedure for vurdering af eksisterende kemikalier. De fire trin er:

- Dataindsamling, hvor eksisterende data er samlet og dokumenteret i IUCLID-databasen
- Prioritering af kemikalier, som er det trin, hvor EURAM benyttes
- Risikovurdering, og
- Risikonedsettelse (hvis nødvendigt)

EURAM beskrives som en forholdsvis simpel prioriteringsmetode, hvor der er foretaget en afbalancering af tidsbesparende, automatiserede (objektive) procedurer med en vis indbygget usikkerhed, og tidskrævende og subjektive ekspertvurderinger, der generelt må formodes at være mere præcise.

Balancen opnås ved at have følgende elementer med i prioriteringen:

- Udtræk af data fra IUCLID til brug ved rankingmetoden
- Ranking af IUCLID-kemikalier ved hjælp af den automatiserede procedure
- Ekspertvurdering af resultaterne og udarbejdelse af et forslag til prioriteringsliste

Mere simpelt kan man sige, at det eksisterende datamateriale anvendes i en numerisk beregningsmodel, der tager hensyn til datamangler og usikkerheder. Resultatet – en score for hvert kemikalie – vurderes derefter af en ekspert(gruppe), der bruger deres erfaring til en yderligere nuancering eller præcisering.

Ved at gennemføre EURAM-rankingen opnås en fælles reference og fokus for den diskussion, der skal munde ud i generelle prioriteringslister. Det skal understreges, at EURAM-rankingen ikke er en risikovurdering, men er et værktøj, der med udgangspunkt i de store datamængder i IUCLID-databasen kan anvendes til at identificere og prioritere de stoffer, der udgør den største potentielle risiko for mennesker og miljø, og som derfor bør underkastes en detaljeret risikovurdering.

EURAM ranker kemikalierne på baggrund af deres potentielle risiko for mennesker og miljø gennem brug af to simple modeller for eksponering/effekt.

Til beregning af miljøscoren bruges værdier for PEC (Predicted Environmental Concentration) og PNEC (Predicted No-Effect Concentration). Begge værdier beregnes efter simple metoder, der er i overensstemmelse med EU's metode til risikovurdering (ref: Technical Guidance Document).

Indholdet i EURAM er beskrevet mere detaljeret i afsnit 3.2.

### 3.3.4 Økotoksicitet i UMIP

#### 3.3.4.1 Effektfaktoren i UMIP - $EF(\text{øtc})_i$

For hvert stof, der udledes til miljøet, skal der i UMIP beregnes en effektfaktor for hvert af delmiljøerne vand (både akut og kronisk toksicitet), jord og renseanlæg, idet det antages at udledninger til luft ikke har økotoksiske effekter, før de når et af de andre delmiljøer.

Effektfaktoren for hvert delmiljø indeholder følgende elementer:

$EF(\text{øtc})_i = f_c * \text{ØF}_c * \text{BIO}$ , hvor

- $f_c$  er den andel af en forbindelse, der ender i et givet delmiljø,
- $\text{ØF}_c$  er økotoksicitetsfaktoren som udtrykker forbindelsens giftighed i delmiljøet og
- BIO er bionedbrydelighedsfaktoren, som udtrykker forbindelsens potentielle nedbrydelighed.

Hver af disse faktorer bidrager på forskellig måde til den samlede vurdering. I det følgende gives der en kort analyse af, hvor vigtige disse bidrag er, specielt set i lyset af hvor stor en usikkerhed, der er ved beregningen af dem.

#### 3.3.4.2 Slutfordeling mellem delmiljøer - "f"

Slutfordelingen mellem delmiljøer beregnes ud fra et stofs troposfæriske levetid og dets flygtighed, udtrykt ved Henry's konstant.

Der regnes ikke med økotoksiske effekter i delmiljøet luft, selvom stoffet udledes som en luftformig emission. I stedet fordeles den udledte mængde mellem delmiljøerne vand og jord efter bestemte retningslinier.

#### 3.3.4.3 Data i IUCLID

IUCLID indeholder ikke kapiteloverskrifter, der direkte henviser til stoffers troposfæriske levetid eller Henry's konstant. Der er derimod data om stoffers fotokemiske nedbrydelighed og transport mellem forskellige delmiljøer, og indenfor disse overskrifter er det muligt at finde de ønskede oplysninger.

Data om fotokemisk nedbrydelighed findes for 1173 stoffer og data om transport mellem forskellige delmiljøer findes for 628 stoffer. Kvaliteten af oplysningerne i relation til UMIP er ukendt, jævnfør ovenstående.

#### 3.3.4.4 UMIP-datakrav og vurdering i forhold til EURAM

UMIPs metode til eksponeringsvurdering afviger fra EURAMs på centrale punkter, idet bionedbrydelighed i UMIP er en del af effektvurderingen, mens det i EURAM er en del af eksponeringsvurderingen. Endvidere anvendes i EURAM en "ren" Mackay-model ved fordelingen i forskellige delmiljøer, mens UMIP bruger Henry's Lov Konstant og halveringstid i troposfæren.

De to metoder har dog det til fælles, at formålet med eksponeringsvurderingen er at få fordelt en udledning på forskellige delmiljøer, hvorefter deres effekt kan beregnes. Det kan ikke vurderes, om anvendelse af EURAM-princippet kan reducere usikkerheden i effektvurderingen af kemikalier. Også EURAM-metoden er en forsimpning af virkeligheden med de usikkerheder, dette medfører.

Det er klart, at en forkert vurdering af et stofs levetid eller flygtighed kan medføre, at toksicitetsbidraget i et givet delmiljø vil blive over- eller undervurderet, men til gengæld vil det omvendte være tilfældet for de andre delmiljøer. Det vurderes, at fremgangsmåden i UMIP er simpel, og at krav til informationer er af en sådan karakter, at fejlvurderinger af denne parameter kun sjældent vil forekomme; og i givet fald ikke have de store konsekvenser.

Hvis UMIP-metoden skal tilnærmes EURAM i forbindelse med eksponering, vil dette kræve en radikal ændring i beskrivelse og anvendelse af det samlede metodeapparat – og dermed også en meget stor arbejdsindsats. Den største fordel ved at gennemføre en sådan ændring er, at UMIP på denne måde bliver tilnærmet andre LCA-metoder, først og fremmest de hollandske, idet disse også anvender Mackay-modeller ved eksponeringsvurderingen. Usikkerheden i de to fremgangsmåder er formodentlig i samme størrelsesorden, og kemikalievurderingen vil derfor ikke nødvendigvis blive mere præcis.

#### 3.3.5 Økotoksicitetsfaktorer – ØF

Økotoksicitetsfaktoren i UMIP er for delmiljøerne jord og vand defineret ud fra den koncentration af stoffet, der vurderes ikke at give nogen effekter i delmiljøet. Denne værdi benævnes PNEC (Predicted No Effect Concentration) og økotoksicitetsfaktoren defineres som den reciprokke værdi af PNEC for delmiljøet. For renseanlæg defineres økotoksicitetsfaktoren ud fra den laveste koncentration af stoffet, LOEC (Lowest Observed Effect Concentration), der findes at give effekter på en bestemt gruppe af mikroorganismer i renseanlægget.

For økotoksicitet i vand udregnes der både en akut og en kronisk økotoksicitetsfaktor, og vurderingen af lokale miljøbelastninger omfatter således i alt fire forskellige effekttyper.

#### 3.3.6 Kronisk økotoksicitet i vand

##### 3.3.6.1 UMIP-metoden

Effekt faktoren for kronisk økotoksicitet i vand,  $\text{ØF}_{\text{v,k}}$ , defineres som

$$\emptyset F_{vk} = \frac{1}{PNEC_{vk}}$$

For kroniske effekter i akvatiske systemer fastlægges PNEC ud fra tilgængelige økotoksicitetsdata, idet den laveste fundne værdi divideres med en vurderingsfaktor. Vurderingsfaktoren afhænger af datakvaliteten, og fastsættes efter følgende retningslinier (Tabel 11)

Tabel 11. Vurderingsfaktorer i UMIP for fastlæggelse af PNEC for kronisk økotoksicitet af stoffer i akvatiske systemer.

Vurderingsfaktor	Kriterium
1000	Der er relativt få data til rådighed, overvejende for akut økotoksicitet eller kun få organismetyper er repræsenteret. QSAR kan anvendes.
100	Der er data for akut økotoksicitet ( $EC_{50}$ ) overfor mindst en art fra hver af klasserne af fisk, krebsdyr og alger
20	Der er data for kronisk økotoksicitet (LOEC) overfor mindst en art fra hver af klasserne af fisk, krebsdyr og alger
10	Der er data for kronisk økotoksicitet (NOEC) overfor mindst en art fra hver af klasserne fisk, krebsdyr og alger

I UMIP tages der til en vis grad højde for, at der kan være datamangel, der fører til anvendelse af en højere vurderingsfaktor, end det reelt er nødvendigt. Hvis der mangler kroniske økotoksicitetsdata for en af de tre klasser, kan man undersøge, om den manglende klasse er den mest følsomme art overfor akut økotoksicitet. Hvis dette ikke er tilfældet, anvendes den mindste vurderingsfaktor (10) i stedet for faktor 100, der er den formelt rigtige faktor.

I vurderingen af PNEC indgår endvidere stoffets evne til at biokoncentrere, d.v.s. blive ophobet gennem fødekæden. Denne evne vurderes ud af fordelingsforholdet mellem n-octanol og vand –  $P_{ow}$ . Hvis logaritmen til  $P_{ow}$  er mindre end 3, betragtes stoffet ikke som biokoncentrerende. Hvis  $\log P_{ow}$  er større end 3, er stoffet potentielt biokoncentrerende, hvilket skal afspejles i de tests, der lægges til grund for beregningen af PNEC. Hvis resultater af sådanne tests ikke er til rådighed, inkluderes i toksicitetsfaktoren en faktor til at korrigere for stoffets biokoncentrering. Korrektionsfaktoren er titallogaritmen til stoffets biokoncentreringsfaktor BCF, og kan i mangel af eksperimentelt bestemte værdier approximeres ved at bruge octanol-vand fordelingsforholdet  $P_{ow}$  for  $\log P_{ow}$  mellem 3 og 7:

$$BCF \sim 0,1 * P_{ow} \Rightarrow \log BCF \sim \log P_{ow} - 1$$

For biokoncentrerende stoffer er den kroniske økotoksicitetsfaktor,  $\emptyset F_{vk}$ , således udtrykt ved:

$$\emptyset F_{vk} = \frac{\log BCF}{PNEC_{vk}} \approx \frac{\log P_{ow} - 1}{PNEC_{vk}}$$

### 3.3.6.2 Data i IUCLID

IUCLID indeholder økotoksicitetsdata, der er delt op i fem (under)kapitler. I nedenstående tabel er de fem kapitler vist sammen med antallet af stoffer, for hvilke der er data i de fem kapitler.

Tabel 12. Datatilgængelig i IUCLID for forskellige typer af tests for akvatisk økotoksicitet.

IUCLID-kapitel	Beskrivelse	Antal stoffer
4.1	Akut/forlænget toksicitet overfor fisk	1675
4.2	Akut toksicitet overfor krebsdyr	1347

4.3	Akut toksicitet overfor vandlevende planter, incl. alger	1123
4.5.1	Kronisk toksicitet overfor fisk	338
4.5.2	Kronisk toksicitet overfor krebsdyr	438

Det bemærkes, at det på baggrund af IUCLID-oplysninger er muligt at beregne en UMIP-effektfaktor for kronisk økotoksicitet i vand, baseret på eksperimentelt bestemte data, for 2/3 af alle HPVC. Det skal også bemærkes, at der for 80% af stofferne vil blive tale om, at PNEC beregnes med en vurderingsfaktor på 100 eller 1000, idet der ikke er kroniske økotoksicitetsdata for mere end ca. 20% af stofferne. Endelig skal det bemærkes, at der for mindst en tredjedel af stofferne hverken er kroniske eller akutte økotoksicitetsdata, og vurderingsfaktoren derfor skal sættes til 1000.

### 3.3.6.3 Datakrav og vurdering i forhold til EURAM

I EURAM følges de samme overordnede principper med hensyn til beregning af PNEC ved hjælp af en vurderingsfaktor, der bestemmes på baggrund af datatilgængelighed og -kvalitet. Følgende retningslinier anvendes:

Tabel 13. Vurderingsfaktorer i EURAM for fastlæggelse af PNEC for kronisk økotoksicitet af stoffer i akvatiske systemer.

Akvatisk effektscore		
Endpoint	Antal arter	Vurderingsfaktor
NOEC	≥ 3	10
NOEC	2	50
NOEC	1	100
L(E)C50	≥ 3	1000
L(E)C50	2	1000
L(E)C50	1	1000

Det skal bemærkes, at vurderingsfaktoren i de to metoder ikke er sammenlignelige. For eksempel kan EC(50) og LC(0) værdier ikke anvendes i EURAM-rankingen. Dette medfører, at datatilgængeligheden i IUCLID er noget mindre for EURAM-rankingen end det antal, der er angivet i ovenstående Tabel 13. For akvatisk økotoksicitet er det vurderet, at data er tilstede for følgende antal af stoffer og tests:

Tabel 14. Datatilgængelighed i IUCLID til brug ved EURAM-rankning.

IUCLID-kapitel	Beskrivelse	Antal stoffer, der opfylder EURAM-definitioner
4.1	Akut/forlænget toksicitet overfor fisk	1286
4.2	Akut toksicitet overfor krebsdyr	1083
4.3	Akut toksicitet overfor vandlevende planter, incl. alger	765
4.5.1	Kronisk toksicitet overfor fisk	266
4.5.2	Kronisk toksicitet overfor krebsdyr	545

Af Tabel 12 og Tabel 14 fremgår det, datakravene i EURAM medfører, at IUCLID-data for ca. 25% af stofferne ikke er af tilstrækkelig kvalitet til at blive anvendt. Den eneste undtagelse er data for kronisk toksicitet overfor krebsdyr, hvor datatilgængeligheden til brug i EURAM tilsyneladende er 25% større end den totale mængde. Der er ikke fundet en forklaring på dette.

### 3.3.7 Akut økotoksicitet i vand

#### 3.3.7.1 UMIP-metoden

Økotoksicitetsfaktoren for akutte effekter i vand,  $\text{ØF}_{\text{va}}$ , er defineret som



$$\text{ØF}_{va} = \frac{1}{\text{PNEC}_{va}}$$

For akvatiske økosystemer fastlægges  $\text{PNEC}_{va}$  ud fra tilgængelige økotoksicitetsdata med følgende vurderingsfaktorer, som det laveste af de fundne toksicitetsdata skal divideres med:

Tabel 15. Vurderingsfaktorer i UMIP ved bestemmelse af PNEC for akut økotoksicitet.

Vurderingsfaktor	Kriterium
100	Der er relativt få data for akut økotoksicitet eller kun få organismetyper er repræsenteret. QSAR kan anvendes.
10	Der er data for akut økotoksicitet ( $\text{EC}_{50}$ ) overfor mindst en art fra hver af klasserne af fisk, krebsdyr og alger

Inddragelse af akut akvatisk økotoksicitet i LCA er lettere kontroversiel, fordi der i udpræget grad vil være tale om lokale og stedsspecifikke effekter. Dette er i modsætning til den normale tankegang i LCA, hvor der primært satses på at beskrive potentielle bidrag, der er uafhængige af de lokale forhold og det tidsmæssige forløb af udledningen. Når effekttypen alligevel er medtaget i UMIP, er det fordi der rent faktisk observeres effekter på økosystemer omkring industrielle udledninger, og effekttypen kan derfor give vigtige signaler om potentielt belastende processer.

### 3.3.7.2 Data i IUCLID

IUCLID indeholder data for 1675 stoffer vedrørende akut/forlænget toksicitet overfor fisk, for 1347 stoffer vedrørende akut toksicitet overfor krebsdyr og for 1123 stoffer vedrørende toksicitet overfor vandlevende planter, incl. alger. Det kan ikke på det foreliggende grundlag opgøres, for hvor mange stoffer der er data om alle tre organismetyper.

### 3.3.7.3 UMIP-datakrav og vurdering i forhold til EURAM

Akut økotoksicitet i vand indgår ikke som et vurderingselement i EURAM-rankingen.

## 3.3.8 Kroniske effekter i jord

### 3.3.8.1 UMIP-metoden

Økotoksicitetsfaktoren for kroniske effekter i jord,  $\text{ØF}_{jk}$ , er defineret som

$$\text{ØF}_{jk} = \frac{1}{\text{PNEC}_{jk}}$$

Ved estimering af PNEC for terrestriske systemer vil relevante økotoksicitetsdata for jordlevende organismer ifølge UMIP kun være tilgængelige for ganske få forbindelser. Derfor anvendes i praksis altovervejende akvatiske data, idet det antages, at jordlevende og akvatiske organismer er lige følsomme for et stof. I udtrykket for  $\text{PNEC}_{jk}$ -værdien korrigeres der dog for, at stoffernes biotilgængelighed er anderledes i jord end i vand.

Korrektionen foretages ved, at gange de kroniske akvatiske økotoksicitetsfaktor med summen af stoffets adsorptionskoefficient i jord;  $K_d$ , og jordens vægtbaserede vandindhold,  $f_w$ . Fremgangsmåden for denne beregning beskrives ikke yderligere i denne rapport, men kan findes Hauschild (ed.), 1996. Det skal dog bemærkes, at der findes beregningsmetoder for fire forskellige typer af stoffer i UMIP, nemlig

- ”Almindelige” stoffer
- Metaller
- Ikke-ioniske organiske forbindelser
- Ioniske organiske forbindelser

### 3.3.8.2 Data i IUCLID

I IUCLID findes der data for 747 stoffer vedrørende deres toksicitet overfor jordlevende organismer. Endvidere findes der data for 783 stoffer med hensyn til toksicitet overfor jordlevende planter og for 806 stoffer med hensyn til toksicitet overfor andre jordlevende arter, der ikke er pattedyr.

### 3.3.8.3 Datakrav og vurdering i forhold til EURAM

I EURAM følges det samme overordnede princip som i UMIP, nemlig at PNEC generelt fastlægges på baggrund af oplysninger om akvatisk toksicitet. Der anvendes de samme vurderingsfaktorer ved vurderingen af toksicitet i jord, som der anvendes ved vurderingen af akvatisk toksicitet.

For at eksponeringsvurderingen i EURAM også skal omfatte topkonsumenter, ganges PEC (Predicted Environmental Concentration) med biokoncentreringsfaktoren, BCF.

BCF bestemmes ud fra følgende tabel:

Tabel 16. Bestemmelse af akkumuleringspotentialer i EURAM-rankingen som funktion af BCF.

Log (BCF)	Potentiale for akkumulering (AP)
$\log(\text{BCF}) \leq 2$	0
$2 < \log(\text{BCF}) \leq 3$	1
$3 < \log(\text{BCF}) \leq 4$	2
$4 < \log(\text{BCF})$	3
Default	3

Hvis der ikke findes oplysninger om BCF i IUCLID, anvendes  $\log(K_{ow})$ , idet  $\log(\text{BCF}) = -1,0 + \log(K_{ow})$  for molekylvægt under 700 og  $\log(\text{BCF}) = 0$ , hvis molekylvægten er over 700. Hvis der heller ikke findes data om  $K_{ow}$ , anvendes default-værdien, som er 3.

### 3.3.9 Effekter i renseanlæg

#### 3.3.9.1 UMIP-metoden

Økotoksicitetsfaktoren for effekter i renseanlæg,  $\text{ØF}_r$ , er defineret som

$$\text{ØF}_r = \frac{1}{\text{PNEC}_{\text{aerob heterotrof}}}$$

PNEC bestemmes på baggrund af oplysninger om LOEC (Lowest Observed Effect Concentration) overfor bakterieslægten nitrosomonas – eller som oftest en estimeret værdi herfor, idet

$$\text{PNEC}_r = \frac{\text{LOEC}_{\text{Nitrosomonas}}}{5} \approx \frac{\text{LOEC}_{\text{aerob heterotrof}}}{10 \cdot 5}$$

I Hauschild (ed), 1996, gives der forslag til litteraturkilder, hvor der kan findes oplysninger om LOEC, der kan anvendes direkte i bestemmelsen af  $\text{ØF}_r$ .

### 3.3.9.2 Data i IUCLID

I IUCLID findes der data for toksicitet overfor mikroorganismer, herunder bakterier, for 1403 ud af 2465 stoffer.

### 3.3.9.3 UMIP-datakrav og vurdering i forhold til EURAM

I forhold til krav om datatilgængelighed i EURAM findes der oplysninger om 645 stoffer i IUCLID.

EURAMs vurderingsmetode adskiller sig fra UMIP ved at have to vurderingsfaktorer (10 og 100), der fastsættes efter følgende retningslinier:

Tabel 17. Vurderingsfaktorer ved fastsættelse af effektfaktorer for toksicitet i rensningsanlæg.

Effektscore for mikroorganismer i rensningsanlæg		
Endpoint	Antal arter	Vurderingsfaktor
NOEC or EC10	≥ 3	10
NOEC or EC10	2	10
NOEC or EC10	1	10
EC50	≥ 3	100
EC50	2	100
EC50	1	100

Den væsentligste forskel er, at der i EURAM skelnes mellem NOEC/EC10-værdier og EC50-værdier, idet vurderingsfaktoren øges med en faktor 10, hvis der kun er EC50-værdier. I UMIP sker gradueringen efter, om der findes data for toksiciteten overfor Nitrosomonas, hvorimod der ikke tages hensyn til testens art.

### 3.3.10 Bionedbrydelighed – BIO

BIO er en faktor, hvis størrelse bestemmes af forbindelsens bionedbrydelighed, som den kommer til udtryk i standardiserede bionedbrydelighedstest. Alt efter resultatet af testen sættes BIO i UMIP til 0,2 (let nedbrydeligt), 0,5 (potentielt nedbrydeligt) eller 1 (ikke nedbrydeligt)..

Hvis der ikke foreligger standardiserede tests, foretages der en vurdering af de bionedbrydelighedsdata, der findes for stoffet i forhold til de kriterier, der gælder for testene. Foreligger der slet ingen tests, regnes stoffet for at være ikke-nedbrydeligt, og BIO sættes til 1.

#### 3.3.10.1 Data i IUCLID

I IUCLID findes der rådata vedrørende bionedbrydelighed for 1493 ud af 2465 stoffer (HPVC).

#### 3.3.10.2 UMIP-datakrav og vurdering i forhold til EURAM

I forhold til de definitioner for datatilgængelighed, der anvendes i EURAM, er der data for 827 stoffer. Det skal bemærkes, at en stor del af denne forskel kan forklares ved, at ældre testmetoder ikke er omfattet af EURAM-definitionen på datatilgængelighed. Resultaterne findes i form af bemærkninger i tekstfelter og vil angiveligt kunne oversættes til en af de tre muligheder, der anvendes i EURAM, nemlig let bionedbrydeligt, potentielt bionedbrydeligt og ikke bionedbrydeligt.

I EURAM anvendes en lidt anden scoring end i UMIP. Forskellen er, at for let nedbrydelige stoffer er faktoren kun 0,1 i modsætning til UMIP, hvor den er 0,2. Dette giver en lidt mere konservativ vurdering i UMIP af de let

nedbrydelige stoffer, men forskellen afspejler i praksis kun de forskellige formål med de to metoder. Som beskrevet i afsnit 3.2.9.1 er det dog et åbent spørgsmål, om en faktor 5 eller 10 er tilstrækkelig til at give en tilstrækkelig nuanceret vurdering af let-nedbrydelige og persistente stoffer.

### 3.3.11 Vurdering af human toksicitet i UMIP

Vurderingen af human toksicitet i UMIP adskiller sig på mange punkter fra vurderingen af økotoksicitet. Dels er der tale om en omfattende liste over mulige påvirkninger af mennesker, spændende fra luftvejsirritation til kræft, og dels er der tale om mange forskellige eksponeringsveje (indånding af forurenede luft, indtagelse af forurenede grundvand, overfladevand og jord gennem munden, og indtagelse af forurenede mad, enten direkte via indtagelse af planter eller indirekte via indtagelse af konsumenter (plante- og kødædere) eller produkter fra disse, f.eks. mælk. Eksponering gennem huden, f.eks. via badevand, er ikke medtaget i UMIP.

Den grundlæggende fremgangsmåde ved vurdering af toksicitet og økotoksicitet er dog den samme, idet det humane toksicitetspotentiale for en udledning  $Q_i$  af et stof (i) defineres som

$$MP(htc)_i = EF(htc)_i * Q_i$$

Effekt faktoren for et givet stof,  $EF(htc)_i$ , har følgende generelle form

$$EF(htc)_i = f_{c,i} * I_c * T_{c,i} * TF_{c,i} * BIO_i \text{ hvor}$$

- $f_{c,i}$  er fordelingsfaktoren for stoffet og et udtryk for, hvor stor en del af udledningen  $Q_i$ , der bidrager til toksicitetspotentialet ved eksponering for delmiljø c
- $I_c$  er indtagelsesfaktoren for delmiljø c og et udtryk for, hvor store mængder af delmiljøet som en gennemsnitsdansker indtager
- $T_{c,i}$  er transport- og overføringsfaktoren for forbindelse (i) ved eksponering for delmiljø c og et udtryk for, hvor effektivt mennesker eksponeres for delmiljøet ved den betragtede overførselsvej
- $TF_{c,i}$  er toksicitetsfaktoren for forbindelse (i) ved eksponering for delmiljø c og et udtryk for forbindelsens giftighed
- $BIO_i$  er bionedbrydelighedsfaktoren for forbindelse (i) og et udtryk for forbindelsens potentielle bionedbrydelighed.

#### 3.3.11.1 Fordelingsfaktor og bionedbrydelighed

Bestemmelse af fordelingsfaktoren  $f_{c,i}$  og bionedbrydeligheden  $BIO_i$  af et stof er beskrevet tidligere i afsnit 3.3.4.2 og 3.3.10. Det skal bemærkes, at der ved vurdering af det humane toksicitetspotentiale også er mulighed for effekter ved indånding og at delmiljøet luft derfor indgår i beregningen.

#### 3.3.11.2 Transport- og overføringsfaktoren

Transport- og overføringsfaktoren beregnes i UMIP gennem anvendelse af en række default-værdier parret med oplysninger om stoffets fysiske-kemiske egenskaber, blandt andet  $P_{ow}$  (octanol-vand fordelingsforhold) og  $pK_a$  (den negative logaritme til stoffets syrestyrkekonstant).

#### 3.3.11.3 Indtagelsesfaktoren

Indtagelsesfaktoren er i UMIP beregnet for de fire delmiljøer luft, vand, jord og grundvand. Værdierne i UMIP er angiveligt gennemsnitsværdier for en

danskers indtagelse af de fire delmiljøer og anvendes som defaultværdier ved beregning af eksponeringseffektiviteten for alle stoffer.

#### 3.3.11.4 Toksicitetsfaktoren

Toksicitetsfaktoren er det element i beregningen af toksicitetspotentialet, der generelt bestemmes med størst usikkerhed. Der anvendes fire forskellige toksicitetsfaktorer i UMIP, en for hver delmiljø.

For delmiljøet luft bestemmes toksicitetsfaktoren som den reciprokke værdi til den luftkoncentration af stoffet, der vurderes ikke at give nogen skadelige effekter ved livslang eksponering. Denne koncentration kaldes Human Reference Concentration, HRC.

For delmiljøerne vand, jord og grundvand bestemmes toksicitetsfaktoren som den reciprokke værdi af den dosis, der vurderes ikke at give nogen skadelige effekter ved livslang indtagelse. Denne dosis kaldes Human Reference Dosis (HRD)

HRD og HRC estimeres ud fra toksikologiske undersøgelser ved metoder, der følger de almindelige principper for fastsættelse af grænseværdier. Et meget væsentligt element i fastsættelse af grænseværdier er anvendelse af vurderingsfaktorer, der tager højde for kvaliteten af de data, der er tilgængelige. I UMIP anvendes følgende vurderingsfaktorer:

Tabel 18. Vurderingsfaktorer ved fastsættelse af HRC og HRD ved vurdering af human toksicitet.

Kriterium	Vurderingsfaktor
Ekstrapolation fra LC <sub>50</sub> eller LD <sub>50</sub> fra dyreforsøg	100.000
Ekstrapolation fra LC <sub>10</sub> eller LD <sub>10</sub> fra dyreforsøg	50.000
Ekstrapolation fra LOAEL fra kortere varende forsøg hos dyr	10.000
Ekstrapolation fra LC <sub>01</sub> eller LD <sub>01</sub> i akutte studier hos mennesker	5.000
Ekstrapolation fra NOAEL i kortere varende forsøg (under et års varighed) eller ekstrapolation fra LOAEL i kroniske forsøg (varighed længere end et år)	1000
Ekstrapolation fra validerede landtidsdyreforsøg (over et års varighed) eller ekstrapolation fra LOAEL i studier hos mennesker eller ekstrapolation fra laveste irritative koncentration ved inhalation hos mennesker	100
Ekstrapolation fra NOAEL fundet i validerede langtidsstudier hos mennesker	10

Tabel 18 viser, at den vurderingsfaktor, der anvendes i beregningen af HRC og HRD ofte spiller en altdominerende rolle for størrelsen af toksicitetsfaktoren. Stoffer, der måske er relativt ugiftige, får tildelt en meget høj "straf" – op til en faktor 10.000 - hvis der ikke er gennemført tilstrækkeligt gode undersøgelser af stoffets toksicitet.

Rent sundhedsfagligt kan der ikke indvendes noget mod dette forsigtighedsprincip, men i LCA-sammenhæng kan det være problematisk, fordi "falsk-positive" stoffer kan være altafgørende i en vurdering, der samlet set omfatter op til flere hundrede stoffer.

For kræftfremkaldende stoffer anvendes den samme fremgangsmåde, selv om det for de fleste af disse stoffer ikke er muligt at fastsætte en tærskelværdi, under hvilken de ikke har en kræftfremkaldende effekt.

For stærkt allergifremkaldende stoffer i delmiljøet overfladevand eller grundvand kan hudkontakt også være en relevant eksponeringsvej. Det

anbefales at anvende en default værdi på 0,01 mg/l som udtryk for den såkaldte Environmental Concern Level (ECL) ved beregningen af en toksicitetsfaktor for de stoffer, der er klassificeret med R43 i listen over farlige stoffer.

### 3.3.11.5 Dataindhold i IUCLID

IUCLID indeholder følgende oplysninger, der kan anvendes i UMIP-metoden til vurdering af human toksicitet:

Tabel 19. Datatilgængelighed i IUCLID til brug ved beregning af toksicitetsfaktorer for human toksicitet.

Kapitel	Kapiteloverskrift	Tilgængelighed
5	Toksicitet	
5.1.1	Akut oral toksicitet	76.96%
5.1.2	Akut inhalationstoksicitet	50.75%
5.1.3	Akut hudtoksicitet	52.94%
5.1.4	Akut toksicitet, andre eksponeringsveje	35.01%
5.2.1	Hudirritation	73.27%
5.2.2	Øjenirritation	72.90%
5.3	Sensibilisering	48.32%
5.4	Toksicitet ved gentagne doser	58.17%
5.5	Genetisk toksicitet <i>in vitro</i>	66.94%
5.6	Genetisk toksicitet <i>in vivo</i>	37.89%
5.7	Carcinogenicitet	43.89%
5.8	Reproduktionstoksicitet	26.00%
5.9	Teratogenicitet	32.01%
5.10	Anden relevant information	51.93%
5.11	Erfaringer med eksponering af mennesker	55.94%

Det skal bemærkes, at oplysningerne om datatilgængelighed i Tabel 19 ikke kan detaljeres yderligere på baggrund af den kommercielle version af IUCLID, der er anvendt i dette forprojekt. Det kan derfor heller ikke vurderes, om det er muligt at reducere de vurderingsfaktorer, der anvendes i UMIP, hvis IUCLID-databasens samlede indhold udnyttes bedst muligt.

### 3.3.11.6 UMIP-datakrav og vurdering i forhold til EURAM

I EURAM-rankingen anvendes alene klassificering af stofferne til vurdering af deres potentielle effekt. Dette gøres ved at benytte Tabel 20.

Tabel 20. EURAM-ranking af human toksicitet ved hjælp af stoffers klassificering.

Carcinogenicitet	Genetisk toksicitet	Reproduktionstoksicitet	Sensibilisering af luftveje	Toksicitet ved gentagne doser	Akut toksicitet	Irritation	Sensibilisering af hud	Sundheds-score
R45 eller R49	R46	R47, R60 eller R61	-	-	-	-	-	10
R40	R40	R62, R63 eller R64	-	-	-	-	-	9
-	Positiv i mindst en <i>in vitro</i> test, men ingen <i>in vivo</i> celletest gennemført	Positiv i en <i>in vivo</i> screening test, men ingen regulær <i>in vivo</i> test, eller positiv i OECD reproduktion screening test	-	-	-	-	-	8
-	Ingen test	Ingen test og ingen gentagen test – eller positiv Chernoff/Kavlock screening test	R42	R48 (giftig)	-	-	-	7
-		Kun gentagen test tilgængelig – eller positiv i screening test	-	R48 (sundhedsskadelig)	-	R34 eller R35 eller R41	R43	6
-	-	Negativ i screening test	-	R33	-	R36 eller R37 eller R38	-	5
-	Positiv i mindst en <i>in vitro</i> test, og kun een negativ <i>in vivo</i> celletest	Negativ i OECD screening test	-	Ingen test	-	-	-	4
-	-	Kun negative resultater i fuld <i>in vivo</i> test(s) for teratogenicitet eller i Chernoff/Kavlock screening test	-	-	R26 eller R27 eller R28	-	-	3
-	Kun negative <i>in vitro</i> genmutation test(s) eller kun negative test for kromosomforandringer i somatiske celler ( <i>in vivo</i> eller <i>in vitro</i> )	Kun negative <i>in vivo</i> tests for frugtbarhed	-	-	R23, R24 eller R25	-	-	2
-	-	-	-	-	R20 eller R21 eller R22	-	-	1
Ingen R-sætning	-	-	Ingen R-sætning	Ingen R-sætning og test gennemført	Ingen R-sætning	Ingen R-sætning	Ingen R-sætning	0

Som værdi for den potentielle effekt på mennesker anvendes den højeste værdi, som en R-sætning eller information om gennemførte tests giver i forhold til Tabel 20. Tallet ganges i ranking-proceduren med en værdi for eksponering, der fastsættes på baggrund af oplysninger om stoffets kogepunkt, damptryk og fordelingsforhold mellem octanol og vand.

Ranking-metoden i EURAM har ikke elementer til fælles med metoden til vurdering af toksicitet overfor mennesker i UMIP. Det skal dog påpeges, at EURAM-metoden i sine grundlæggende træk har meget til fælles med UMIP's screeningsmetode til vurdering af human toksicitet. Da EURAM-metoden er anerkendt af myndigheder i 16 lande samt adskillige industriorganisationer, vil det være oplagt at bruge EURAM-metoden og mærkning/klassificering i IUCLID-databasen (eller officielle lister) som udgangspunkt, hvis der skal ske en forbedring af screeningsdelen i UMIP-metoden. Det bemærkes dog, at heller ikke denne fremgangsmåde vil kunne give en relation mellem screeningen og resultater i form af personækvivalenter.

### 3.3.12 Diskussion – udnyttelse af data i IUCLID

Den ovenstående gennemgang af en række vigtige elementer i UMIP-metoden til vurdering af økotoksicitet og human toksicitet viser, at IUCLID indeholder store mængder data, der eventuelt vil kunne udnyttes til fastsættelse af mere præcise effektfaktorer for en lang række stoffer.

Den version af IUCLID-databasen, der er blevet anvendt i dette forprojekt, giver ikke mulighed for en mere præcis analyse af, for hvilke stoffer, der findes de ønskede oplysninger. Søgemulighederne i databasen er begrænset til CAS- og EINECS-numre, synonymer og R-sætninger, og ved en udnyttelse af databasens oplysninger er det derfor nødvendigt at anvende en case-til-case fremgangsmåde.

Der er ikke i forprojektet undersøgt, hvordan de effektfaktorer, der findes i UMIP i dag, er blevet beregnet, dokumenteret og lagret. Ideelt set burde alle informationer findes i en separat, standardiseret format for hvert stof, f.eks. i et regnearksprogram, men dette behøver ikke at være tilfældet fordi effektfaktorerne er blevet udviklet i forskellig sammenhæng og eventuelt også af forskellige personer/institutioner.

#### 3.3.12.1 Forslag til videre arbejde

Erfaringsmæssigt er de mest præcise effektfaktorer udviklet for de toksikologisk mest velkendte stoffer, f.eks. SO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, N<sub>2</sub>O, tungmetaller m.v. Årsagen til dette er dels, at der findes relativt mange og gode undersøgelser af disse stoffers toksicitet og økotoksicitet, dels at netop disse stoffer langt hen ad vejen er blevet brugt til at kalibrere den samlede vurderingsmodel. Det sidste er naturligvis et postulat, men det underbygges af, at effektfaktoren for mange stoffer er blevet ændret flere gange, formodentlig fordi der enten i en konkret vurdering eller ved udarbejdelse af normaliseringsreferencerne har vist sig uventede resultater, der har medført en mere detaljeret gennemgang af det tilgængelige datamateriale for udvalgte stoffer.

Den mest præcise vurdering opnås for de stoffer, hvor vurderingsfaktoren er så lav som mulig, d.v.s. at datagrundlaget har været godt. IUCLID har ikke været direkte inde i billedet ved etableringen af effektfaktorer, og med det store antal oplysninger, der potentielt kan anvendes i UMIP, er det realistisk at tro, at vurderingsfaktoren for en del stoffer kan reduceres med en faktor 10 –



eller måske faktor 100. Det samme er naturligvis tilfældet, hvis der gennemføres intensive datasøgninger og efterfølgende vurderinger.

Alt andet lige skønnes det, at de største forbedringsmuligheder ligger i en revurdering af de stoffer, der i toksicitets- og økotoksicitetsvurderingen er blevet tillagt en høj vurderingsfaktor, f.eks. faktor 10.000 eller 100.000 for human toksicitet og faktor 1000 for økotoksicitet. Her vil forholdsvis enkle tests vedrørende f.eks. akut toksicitet kunne nedsætte vurderingsfaktoren med en faktor 10.

Det skal dog også bemærkes, at vurderingsfaktoren også nedsættes med en faktor 10, hvis der i stedet for oplysninger om akut toksicitet anvendes data for f. eks. NOAEL fra forsøg, hvis varighed er under et år.

Det er realistisk at tro, at effektfaktoren for mange stoffer bliver mere præcis, hvis data fra IUCLID anvendes i beregningen. Det skal dog bemærkes i denne forbindelse, at IUCLID-data ikke nødvendigvis er blevet valideret, inden de er blevet lagret i databasen.

Det skal også bemærkes, at en del undersøgelser i IUCLID ikke lever op til de formelle krav, der i dag stilles til toksikologiske og økotoksikologiske tests. Dette svækker naturligvis troværdigheden af disse undersøgelser, men en vurdering foretaget af specialister i toksikologi og økotoksikologi vil i de fleste tilfælde give et væsentligt fingerpeg, om det er relevant at bruge det pågældende datasæt. Hvis der ikke er alvorlige mangler, foreslås det at udnytte sådanne datasæt til forbedring af UMIP. Det skal huskes, at formålet med UMIP-vurderingen ikke er at give en præcis (risiko)vurdering af enkeltstoffer, men at give et bredt dækkende billede af de miljøbelastninger, et produkt forårsager i sit livsforløb, herunder at potentielle bidrag til toksicitet og økotoksicitet er repræsenteret i vurderingen.

Afslutningsvis foreslås det derfor, at effektfaktorerne for stofferne i UMIP revurderes efter en fælles skabelon. Det primære mål for revurderingen er de stoffer, der findes i IUCLID, d.v.s. High Production Volume Chemicals (HPVC). Ved at gennemføre denne vurdering sikres det, at der findes effektfaktorer for en lang række af de kemikalier, der anvendes i diverse produkter, enten direkte som råvare eller som mellemprodukt. Industrier, der anvender LCA i deres miljøarbejde, vil dermed kunne genfinde deres eget bidrag i det samlede og ofte komplekse livscyklusbillede.

Alt efter tidshorisonten for denne revurdering foreslås det, at HPVC-stoffer, hvor vurderingsfaktoren i UMIP er relativ høj (1000 for økotoksicitet, 10.000 eller 100.000 for human toksicitet) får højeste prioritet. Den næste revurdering kan omfatte stoffer med vurderingsfaktor 100/5.000 o.s.v. Det skal dog bemærkes, at der ideelt set bør foretages en revurdering af den samlede mængde stoffer i UMIP, således at alle er blevet vurderet på det samme datagrundlag. Det vigtigste formål med revurderingen er at reducere vurderingsfaktoren, hvor det er muligt. Det foreslås dog, at alle parametre, der indgår i vurderingen, gennemgås ved samme lejlighed. Dels er det muligt, at IUCLID indeholder bedre data, end de der oprindeligt er blevet anvendt, og dels kræver dette arbejde kun en lille ekstra indsats i forhold til en revision af de toksikologiske vurderinger.

Det foreslås også at gennemføre revurderinger af udvalgte stoffer, der ikke er inkluderet i IUCLID. Både miljø- og sundhedsfagligt og politisk har der i de

senere år været fokus på specifikke stofgrupper som dioxiner, furaner, PAH'er, partikler (PM10) med videre. Ingen af disse stoffer er inkluderet i IUCLID, og vil formodentlig heller aldrig blive det. At stofferne alligevel er interessante i LCA-sammenhæng skyldes, at de udledes som resultat af industrielle processer, blandt andet affaldsforbrænding, og i forbindelse med transport. Dermed er de en betydende faktor i langt de fleste livscyklusvurderinger, ligesom de også bidrager til normaliseringsreferencen for toksicitet og økotoksicitet.

### 3.3.13 Diskussion – Datakrav i UMIP og EURAM

Der er to vidt forskellige formål med stofvurderingerne i UMIP og EURAM. UMIP skal sikre, at potentielle bidrag til toksicitet og økotoksicitet er repræsenteret i en helhedsvurdering, mens EURAM sigter på at prioritere hvilke kemiske stoffer, der skal gennemgå en risikovurdering og – eventuelt – være genstand for en nedsættelse af risikoen gennem forskellige tiltag.

Ingen af de to metoder er således en risikovurdering, selvom mange af elementerne i de to metoder også er indeholdt i en risikovurdering.

En væsentlig forskel mellem de to metoder – i det mindste i matematisk henseende – er at alle vurderinger i EURAM munder ud i et tal, der ligger i intervallet fra 0 til hundrede, mens UMIPs effektfaktorer går fra 0 til et tal, der formodentlig kan være  $10^9$  eller højere.

I miljøfaglig henseende er den største forskel eksponeringsvurderingen. I EURAM tages der udgangspunkt i den producerede mængde, der efterfølgende fordeles i forskellige delmiljøer ved hjælp af Mackay's niveau 1-model. I UMIP tages der udgangspunkt i de opgørelser ("inventories") på procesniveau, der anvendes overalt i LCA, og hver enkelt emission fordeles derpå i de enkelte delmiljøet ved hjælp af oplysninger om deres troposfæriske halveringstid og deres flygtighed, bestemt ved Henry's konstant.

Der er ikke i dette forprojekt taget stilling til, om den ene form for eksponeringsvurdering er mere præcis end den anden. Det konstateres, at der ikke er et nævneværdigt overlap i datakravene, der gør det operationelt at kombinere elementer fra de to metoder – eller at substituere elementer.

Ved udarbejdelse af effektfaktorer for enkeltstoffer er der til gengæld et stort sammenfald mellem de to metoder. Det er de samme grundlæggende principper fra risikovurdering og udarbejdelse af grænseværdier, der anvendes. Dette betyder også, at det stort set er den samme spændvidde i vurderingsfaktorer, der anvendes til at ekstrapolere fra en relativ dårlig datakvalitet til en effektfaktor, der er sammenlignelig med den for andre stoffer. Det vurderes, at UMIP-modellen i denne henseende er mindre konservativ end EURAM i sine datakrav. Det betyder, at en ændring af UMIP henimod EURAMs datakrav vil betyde, at en række stoffer vil blive tillagt en vurderingsfaktor, der er mellem 2,5 og 10 gange højere, end den er i øjeblikket i UMIP. De praktiske konsekvenser af dette er ikke vurderet i forprojektet.

Med hensyn til vurderingen af human toksicitet er der et stort sammenfald mellem UMIPs screeningsmetode og EURAMs vurderingsmetode. Det betyder meget firkantet, at det ikke er muligt at anvende EURAM-elementer til at gøre UMIPs kvantitative vurderingsmetode mere præcis. Til gengæld kan det ved given lejlighed overvejes at modificere UMIPs screeningsmetode henimod EURAMs vurderingsmetode, idet EURAM forekommer at være

mere operationel i både effekt- og i eksponeringsvurderingen og dermed også et potentielt bedre værktøj til at prioritere mellem valg af forskellige stof/proces-kombinationer. Det skal dog pointeres, at det vil være nødvendigt at estimere de udledte mængder fra en given proces, før det fulde potentiale i EURAM-metoden kan udnyttes.

### 3.4 USES-LCA

Holland har på linie med Danmark været et foregangsland ved udvikling af metoder til vurdering af økotoksicitet og human toksicitet i LCA. I skrivende stund (ultimo 2000) er et revideret sæt Guidelines under udarbejdelse, til erstatning for det sæt, der blev udviklet af Heijungs *et al.*, 1992. Et væsentligt element i de nye Guidelines er en beskrivelse af en metode til beregning af toksicitetspotentialer (Huijbregts (1999)).

Udgangspunktet for den nye hollandske metode er en risikovurderingsmodel, Uniform System for Evaluation of Substances 2.0 (USES 2.0), der er tilpasset de specielle behov i LCA gennem at ændre diverse forudsætninger og default-værdier. Resultatet af ændringerne er beregningsmodellen USES-LCA, der gennem anvendelse af stofs specifikke data kan beregne toxicitetspotentialer i følgende delmiljøer efter en første udledning til henholdsvis luft, ferskvand, saltvand, industriel jord og landbrugsjord:

- Økotoksicitet i ferskvandsmiljøer
- Økotoksicitet i saltvandsmiljøer
- Økotoksicitet i jord
- Økotoksicitet i ferskvandssediment
- Økotoksicitet i saltvandssediment
- Human toksicitet

Den hollandske fremgangsmåde ved fastsættelse af effektfaktorer for toksicitet overfor økosystemer og mennesker er væsentlig forskellig fra fremgangsmåden i UMIP, om end mange grundlæggende principper er de samme.

Den væsentligste forskel til UMIP er overordnet, at toksicitetspotentialet beregnes relativt til et referencestof, 1,4-dichlorbenzen. I alt beregnes der 30 toksicitetspotentialer for hvert stof, der i de efterfølgende beregninger aggregeres for de enkelte delmiljøer. På denne måde opnås det i USES-LCA, at vurderingen af toksicitet og økotoksicitet følger de samme principper som ved vurderingen af bidrag til globale og regionale effekter, nemlig at der kan beregnes en ækvivalensværdi.

Betydningen af denne forskel mellem de to metoder diskuteres ikke yderligere i denne rapport. I stedet lægges der vægt på en beskrivelse af fremgangsmåden i den model, der bruges til at beregne stoffers fordeling og skæbne i miljøet, samt i vurderingen af stoffers toksicitet.

#### 3.4.1 Eksponering i miljøet

I praksis er den væsentligste forskel mellem UMIP og USES-LCA, at modelleringen af stoffers spredning og skæbne i miljøet er noget mere detaljeret i USES-LCA. Det øgede detaljeringniveau i beregningerne har som en fordel, at det er muligt at tage hensyn til flere fysisk-kemiske stofegenskaber, der kan variere alt efter de omstændigheder, hvorunder

udledningen finder sted. Denne fordel medfører på samme tid et omfattende arbejde med vurdering af de enkeltstoffer og stofgrupper, der opfører sig forskelligt fra de grundlæggende antagelser i modellen.

Det er uden for dette forprojekts rammer at beskrive de specifikke overvejelser for enkeltstoffer og stofgrupper i detaljer. For en sådan beskrivelse henvises til Huijbregts (1999). I stedet peges der på de stoffer og stofgrupper, der bør behandles med særlig omhu ved udarbejdelsen af effektfaktorer, idet de samme overvejelser med stor sandsynlighed er relevante i andre LCA-metoder, herunder UMIP.

Tabel 21. Stoffer og stofgrupper, der i USES-LCA kræver særlige overvejelser ved beregning af deres fordeling og skæbne i miljøet.

Stof/stofgruppe	Parameter	Kommentar
Kviksølv og methylkviksølv	Fordelingskoefficient	Forskellig fra andre metaller, f.eks. har kviksølv en høj luft-vand fordelingskoefficient i luftfasen.
Partikler (PM10)	Fordelingskoefficient	Aerosol-binding og -deposition
SO <sub>2</sub> , NH <sub>3</sub> , HCl, HNO <sub>3</sub> , H <sub>2</sub> S	Fordelingskoefficient	Scavenging ratios, d.v.s. forholdet mellem koncentration i nedbør og i luft
Metaller, PM10, fentinacetat, zineb	Nedbrydning og omdannelse	Ekstremt lange halveringstider antages i modellen
3-chloranilin, 1,2,3- og 1,3,5-trichlorbenzen, 1,2,3,4- og 1,2,3,5-tetrachlorbenzen	Nedbrydning og omdannelse	Vurderes ved analogislutninger til lignende stoffer
dihexyl- diisodecyl- og diisooctylphthalat	Anaerob nedbrydning	Beregnes ved at gange halveringstiden for aerob nedbrydning med forholdet mellem anaerob og aerob nedbrydning for di(n-octyl)phthalat
Metaller, både generelt men også specifikt for barium, molybdæn, tin, antimon og methylkviksølv	Biokoncentrering i forskellige miljøer	QSAR kan ikke bruges, derfor anvendes ekstrapolation og gennemsnitsbetragtninger

### 3.4.2 Effektvurdering i USES-LCA

Effektvurderingen i USES-LCA anvender indirekte EU's Technical Guidance Document (TGD) til at beregne økotoksikologiske effektfaktorer, idet PNEC-værdier fra andre projekter, der har brugt fremgangsmåden i TGD, også anvendes i USES-LCA. I TGD anvendes statistisk ekstrapolation, vurderings/sikkerhedsfaktorer eller ligevægtsfordelings-metoden.

Den statistiske ekstrapolationsmetode er baseret på den antagelse, at følsomheden af forskellige arter i et økosystem kan beskrives ved en statistisk fordeling. I praksis anvendes den, når der oplysninger om fire eller flere NOEC fra forskellige taxonomiske grupper. Hvis der er oplysninger om mindre end fire NOEC, anvendes der sikkerhedsfaktorer efter de retningslinier, der er beskrevet i 3.3.6.3. Hvis der stort set ikke findes oplysninger om NOEC for jordlevende organismer, anvendes ligevægtsfordelingsmetoden, idet det bl.a. antages, at følsomheden af vand- og jordlevende organismer er sammenlignelig. Alle effektfaktorer for sediment i USES-LCA er beregnet ved hjælp af denne metode.

Der er kun angivet få stofspecifikke kommentarer med hensyn til økotoksicitet i Huijbregts (1999). Generelt er PNEC den samme for ferskvand- og saltvandsarter, idet den eneste undtagelse er organotin-forbindelser. Ved fastsættelsen af PNEC for metaller indgår baggrundskoncentrationen ikke i

USES-LCA, idet det i LCA er den potentielle effekt af en ekstra udledning af et stof, der er interessant, og ikke risikoen fra den totale koncentration af det pågældende stof i miljøet. Da den altovervejende del af baggrundskoncentrationen af metaller ikke skyldes økonomiske aktiviteter, er det ikke behørigt at medtage denne i vurderingen.

Med hensyn til human toksicitet anvender USES-LCA grænseværdier for indtagelse gennem munden (oral) og via inhalation. Grænseværdierne tages fra offentliggjorte vurderinger, blandt andet fra WHO, RIVM og USEPA. Hvis der ikke findes grænseværdier for indtagelse på den ene eller anden måde i litteraturen, ekstrapoleres der på basis af biotilgængeligheden ved inhalation og oral indtagelse.

Ved fastsættelse af effektfaktorer for human toksicitet er der taget hensyn til en række specielle forhold for udvalgte stoffer og stofgrupper. Disse gengives meget kortfattet i nedenstående tabel:

Tabel 22. Stoffer og stofgrupper, for hvilke der er taget specielle hensyn ved udarbejdelse af effektfaktorer for human toksicitet.

Stof/Stofgruppe	Problem/Hensyn	Kommentar/løsning
2,3,7,8-TCDD	Oral grænseværdi fra WHO og RIVM skønnes ikke at være tilstrækkelig konservativ	Grænseværdien nedsættes med en faktor 10 til 1 pg/kg bwt/dag
PM10	Hverken den hollandske grænseværdi på 40 µg/m <sup>3</sup> eller WHO's på 70 µg/m <sup>3</sup> skønnes at være tilstrækkelig konservativ	Den mest konservative grænseværdi benyttes
1,3-dichlorbenzen, dihexylphthalat og dimethylphthalat	Ingen data til fastsættelse af grænseværdier	Default-værdier for ikke-genotoksiske stoffer anvendes
Carcinogene PAH'er	Grænseværdier er fastsat for kræftfremkaldende PAH'er som gruppe og ikke for enkeltstoffer	Toksicitetspotentialer beregnes for kræftfremkaldende PAH'er som gruppe, idet en typisk sammensætning af gruppen anvendes som vægtningsgrundlag ved beregning af både skæbne og effekt.

De ovenstående undtagelser afspejler sandsynligvis de problemstillinger, der har været i fokus ved udvikling og afprøvning af USES-LCA. Specielt har problemer omkring vurdering af phthalater og dioxiner været i fokus i diskussionen af anvendelse af PVC. For en mere detaljeret beskrivelse af denne diskussion henvises til Tukker, 1998.

Det kan således tænkes, at der ved fremtidige vurderinger af andre stoffer og stofgrupper vil dukke lignende problemer op. Eksemplerne understreger, at der ofte vil være behov for at tage specifikke problemstillinger op til en mere dybtgående vurdering, hvis de er centrale i beslutningsgrundlaget. Dette behov vil opstå uanset metodevalg, og den ideelle løsning, nemlig at fremskaffe høj-kvalitetsoplysninger, er kun sjældent realistisk.

En anden – og mere overordnet – problemstilling er anvendelsen af worst-case antagelser og estimater i beregningen af effektpotentialer. Huijbregts (1999) mener, at effektfaktorerne ideelt set skulle justeres, så de afspejler mere realistiske forhold. På den anden side er det også et praktisk argument, at det i vurderingen af et stof "straffes", hvis datatilgængeligheden er lav. Et andet argument er, at anvendelse af sikkerhedsfaktorer i vurdering af effektpotentialer for human toksicitet ikke behøver at være så konservativ, hvis hovedformålet

er at beskytte størstedelen af befolkningen (sic). Konklusionen på den meget kortfattede diskussion i Huijbregts (1999) er, at det ikke i den konkrete situation er en gennemførlig opgave at justere de sikkerhedsfaktorer, der anvendes som default, hen imod mere troværdige estimater.

### 3.4.3 Relation til UMIP

En række af de mest betydende forskelle og ligheder mellem USES-LCA og UMIP er allerede beskrevet i de foregående afsnit.

På baggrund af gennemgangen kan der ikke peges på delelementer i USES-LCA, som vil kunne nedsætte usikkerheden væsentligt i UMIP's kemikalievurdering. De grundlæggende elementer og fremgangsmåder i de to metoder er blevet fastlagt i et tidsmæssigt parallelt forløb i den første halvdel af 1990'erne. Metodediskussioner under forløbet - først og fremmest i SETAC-regi - viste, at de to tilgangsvinkler ikke var væsensforskellige i deres målsætning og omfang. Den samme konklusion blev nået på en dansk-hollandsk workshop, der blev afholdt i efteråret 1999 med det formål at diskutere nye tiltag i udviklingen af LCA-metoder.

I effektvurderingen for økotoksicitet er der en mindre forskel mellem de to metoder, idet USES-LCA anvender det geometriske gennemsnit af forskellige værdier for NOEC, når der er fire eller flere forskellige målinger for forskellige arter, mens UMIP anvender den mindste værdi (= den mest belastende). Hvis der er mindre end fire værdier for NOEC, anvendes der er sikkerhedsfaktor. Det samme princip anvendes i øvrigt også på andre parametre, når der er adskillige måleværdier. I praksis betyder dette, at relativt velundersøgte stoffer får en mindre effektfaktor, mens mindre velundersøgte stoffer stadig vurderes på baggrund af den mest belastende værdi for deres toksicitet, sammen med en sikkerhedsfaktor. Det antages, at fremgangsmåden kun kan anvendes på et fåtal af stoffer, og dermed kun sjældent vil have indflydelse på en samlet vurdering.

I vurderingsmodellen for human toksicitet er der i UMIP taget et overordnet hensyn til de fleste specielle problemer, der er i vurderingen af visse stoffer og stofgrupper. Dette er gjort ved en beskrivelse af beregningsproceduren for en række stofgrupper i relation til de enkelte delmiljøer. Helt specifikke problemer, f.eks. omkring vurdering af phthalater og dioxiner, er dog ikke beskrevet i detaljer.

I human toksicitet spiller indtagelsesfaktoren, d.v.s. hvor meget en gennemsnitsperson indtager af luft, vand og fødemidler, en væsentlig rolle. I UMIP er indtagelsefaktorer for levnedsmidler baseret på danske gennemsnit, mens USES-LCA anvender hollandske, amerikanske og europæiske gennemsnitstal. USES-LCA værdierne for indtagelse er generelt noget lavere end de værdier, der anvendes i både grundmodellen USES 2.0 og i UMIP.

Hvordan forskellene i de to metoder afspejler sig i praktiske LCA-vurderinger kan ikke vurderes. Dels er der tale om forskelle i effektkategorier og dels er der forskel i den overordnede vurderingsmetode (ækvivalensberegninger/ fortynding til uskadelige koncentrationer). Dertil kommer de forskelle, som spredningsmodellerne medfører. Diskussionerne i Huijbregts (1999) beskrivelse af USES-LCA og i Tukker (1998) tyder på, at det er den samme type af problemstillinger, man støder på, når LCA anvendes til mere vidtrækkende politiske beslutninger.

### 3.5 Brug af QSAR til effektvurderinger

Effektvurderinger ved hjælp af QSAR (Quantitative Structure Activity Relationship) er en fremgangsmåde, der vinder mere og mere indpas, også i relation til myndighedernes arbejde på kemikalieområdet.

En SAR-model eller en QSAR-model er en relation mellem et stofs kemiske struktur og en givet aktivitet eller egenskab, f.eks. fysisk-kemiske egenskaber eller toksikologiske parametre. Ved udviklingen af en model sammenlignes en række kemiske stoffers strukturegenskaber (molekylære deskriptorer) med målte værdier for den aktuelle egenskab gennem et såkaldt træningssæt. Målet er at fastlægge hvilke deskriptorer, der på en afgørende måde er forbundet med den undersøgte egenskab, og derefter sætte en matematisk relation op mellem disse deskriptorer og den pågældende egenskab. Deskriptorerne kan omfatte  $\log K_{ow}$ , molekylært index, kvantemekaniske egenskaber, form, størrelse, ladning, elektronfordelinger mm., og sammenligningen udføres ofte ved hjælp af statistiske metoder.

SAR-modeller kan give en kvalitativ forudsigelse af, om et stof besidder en given egenskab eller ikke, mens en QSAR-model giver en kvantitativ forudsigelse af denne egenskab, f.eks. i form af en  $LD_{50}$ -værdi.

Fordelen ved QSAR er, at det er muligt at vurdere en stor mængde stoffer på kort tid, når først QSAR-modellerne er udviklet og udvalgt, men QSAR kan naturligvis også benyttes ved vurdering af enkeltstoffer. Det er dermed muligt at få en indikation af farligheden af stoffer, for hvilke der ikke findes dokumentation i form af fysisk-kemiske egenskaber eller toksikologiske undersøgelser.

Der findes i dag en lang række modeller til vurdering af forskellige stofegenskaber, som med 70-85% statistisk sikkerhed kan forudsige, om et stof har de egenskaber, som modellen undersøger. De fleste modeller er computerbaserede, og mange modeller kan downloades uden beregning fra forskellige websites. I Miljøprojekt Nr. 635 (2001) findes en kort gennemgang af nogle af de programmer, der er tilgængelige. Den amerikanske miljøstyrelse (EPA) har lagt en række modeller ud på deres hjemmeside til gratis benyttelse (<http://www.epa.gov/oppt/exposure/docs/episuitedl.htm>).

#### 3.5.1 Miljøstyrelsens Vejledende liste til selvklassificering af farlige stoffer

Som et eksempel på anvendelse af QSAR har Miljøstyrelsen for nylig udgivet en vejledende liste til selvklassificering af farlige stoffer, der på baggrund af QSAR-vurdering af 47.000 kemiske stoffer indeholder forslag til klassificering af mere end 20.000 af disse for en eller flere af de udvalgte farlige egenskaber.

Miljøstyrelsen har i deres QSAR-vurdering medtaget modeller, der belyser følgende egenskaber:

- Akut dødelig virkning ved indtagelse
- Allergifremkaldende effekt ved hudkontakt
- Skader på arveanlæggene
- Kræftfremkaldende effekt og
- Farlighed for vandmiljøet

Af disse er det i LCA/UMIP-sammenhæng især QSAR-vurdering af akut dødelig virkning ved indtagelse og farlighed for vandmiljøet, der har størst interesse, idet disse egenskaber indgår direkte i fastsættelse af effektfaktoren for et kemisk stof. Allergifremkaldende, genotoksiske og kræftfremkaldende egenskaber medtages også i UMIP i den udstrækning, der findes kvantitative oplysninger om et effektniveau, der kan bruges til at estimere en tærskelværdi, men er ikke operationaliseret i helt samme grad.

#### 3.5.1.1 QSAR til beregning af akut dødelig virkning ved indtagelse

TOPKAT-modellen blev anvendt til beregning af LD<sub>50</sub>-værdier. Stoffer med forudsigelser eller testresultater, der viste at LD<sub>50</sub> (oral, rotter) var mindre end eller lig med 2000 mg/kg, blev medtaget på listen med den vejledende klassificering Xn;R22. Overordnet set tages der således kun udgangspunkt i, om stoffet skal klassificeres eller ej. I princippet skulle modellen også kunne skelne mellem forskellige klassificeringskriterier (LD<sub>50</sub> = 25 mg/kg (Tx;R28), 25 mg/kg < LD<sub>50</sub> ≤ 200 mg/kg (T;R25) og 200 mg/kg < LD<sub>50</sub> ≤ 2000 mg/kg (Xn;R22)). Denne mulighed for kvantificering er en forudsætning for at anvende denne type af QSAR i LCA, idet der ellers kan blive introduceret en usikkerhed på faktor 80 (forskellen mellem laveste og højeste LD<sub>50</sub>, der fører til klassificering).

#### 3.5.1.2 QSAR til beregning af farlighed for vandmiljøet

EU's klassificeringskriterium er sammensat af tre hovedelementer, i.e. bionedbrydning, biokoncentreringspotentiale og giftighed overfor vandlevende organismer. De tre elementer indgår også i UMIP's beregning af effektfaktorer for økotoksicitet, og det er derfor muligt at øge mængden af stoffer, for hvilke der er fastsat en effektfaktor for økotoksicitet gennem at anvende QSAR.

*Bionedbrydning* blev bestemt ved hjælp af Syracuse's BIOWIN program, idet der kun blev anvendt den lineære ligning for hurtig/ikke-hurtig nedbrydning. Resultatet af vurderingen er en forudsigelse af om stoffet nedbrydes hurtigt eller ej, samt et estimat af tidshorizonten for nedbrydningen. I relation til UMIPs vurderingsmetode kan denne QSAR anvendes til at placere et stof i et af ydergrupperne (let nedbrydeligt eller ikke nedbrydeligt), mens der ikke er den samme mulighed for at placere stoffet i den tredje gruppe, potentielt nedbrydeligt. Det vurderes i Miljøprojekt Nr. 635, at modellen ikke fanger alle de ikke-letnedbrydelige stoffer, men at antallet af falsk-positive forudsigelser for mangel på nedbrydelighed er acceptabelt lille.

*Biokoncentrering* blev bestemt ved hjælp af Syracuse's BFCWIN program, der er baseret på en kombination af QSAR for log K<sub>ow</sub> og strukturelle fragmentkategorier. Denne fremgangsmåde giver angiveligt en signifikant forbedring i forhold til den standardligning (BCF = 0.85 \* log K<sub>ow</sub> - 0.70), der ofte benyttes til at estimere biokoncentreringsfaktoren ud fra log K<sub>ow</sub>. Resultatet af QSAR-beregningen er en værdi for både log K<sub>ow</sub> og BCF, som kan anvendes direkte i beregningen af effektfaktorer i UMIP.

I klassificeringen for farlighed for vandmiljøet anbefales det at anvende værdier for akut giftighed overfor både fisk, dafnier og alger, selvom der kun sjældent er værdier for alle tre arter. I Miljøprojekt Nr. 635 blev kun giftighed overfor fisk forudsagt på baggrund af QSAR, på grund af deres pålidelighed og tilgængeligheden af testresultater af høj kvalitet til metodeudvikling. Den model, der blev anvendt (M-CASE), blev udviklet af Miljøstyrelsen. Resultat-



formatet er ikke beskrevet nærmere i rapporten, men det må antages at modellen på linie med andre modeller forudsiger en  $LC_{50}$ -værdi.

### 3.5.2 Andre faktorer, der indgår i beregning af effektfaktorer

I den ovenstående gennemgang er der kun beskrevet få udvalgte parametre, der kan bestemmes ved hjælp af QSAR. Til brug ved beregning af effektfaktorer i UMIP kan der være behov for andre parametre, såvel fysisk-kemiske som toksikologiske. Det vurderes, at der allerede på nuværende tidspunkt er udarbejdet modeller, der kan foretage de ønskede beregninger for mange stofgrupper. Som et eksempel gengives i det følgende en oversigt, udarbejdet af EPA, over nogle af de parametre i vurderingen af HPVC, som der i 2000 var QSAR-modeller for. Det ligger uden for dette forprojekts rammer at give en nærmere beskrivelse og vurdering af deres gyldighedsområde og nøjagtighed.

#### Fysisk-kemiske egenskaber

- Smeltepunkt
- Kogepunkt
- Damptryk
- Octanol/vand fordelingskoefficient
- Henry's lov konstant
- Vandopløselighed

#### Skæbne i miljøet

- Fotonedbrydelighed
- Hydrolyse
- Adsorption til jord
- Fjernelse i renselanlæg
- Biokoncentrering
- Bionedbrydelighed (modeller er mindre accepteret)

#### Økotoxicitet

- Toksicitet overfor fisk
- Toksicitet overfor invertebrater
- Toksicitet overfor alger

#### Toksicitet

- På grund af de mange end-points betragtes QSAR af sundhedseffekter som væsentlig mere kompliceret end andre QSAR-beregninger. Der findes en del modeller, men ikke mange er validerede. Til brug for vurdering af HPVC-stoffer skal SAR/QSAR-beregninger altid følges af forsøgsdata, der har en tæt analogi.

I EU's Technical Guidance Document for risikovurdering af kemikalier foreslås QSAR-vurderinger til brug for en række end-points, der er knap så omfattende som i EPA's retningslinier: Toksicitet overfor vandlevende organismer, Kow, Koc, biokoncentrering i fisk og jordlevende organismer, bionedbrydelighed, fotonedbrydelighed, hydrolyse, og Henry's Lov Konstant. Af disse er QSAR for Koc og biokoncentrering inkluderet i EUSES-modellen (ECB, 1997).

### 3.5.3 Overordnede bemærkninger til anvendelse af QSAR i LCA

QSAR-modeller kan anvendes til at udfylde nogle af de datamangler, der er ved beregning af effektfaktorer til UMIP. Det skønnes således at være muligt for mange stoffer at beregne en eller flere effektfaktorer alene ved hjælp af QSAR, om end usikkerheden på denne type af beregninger er relativ stor – for nogle parametre op til faktor fem i forhold til målte værdier.

Det må umiddelbart anses som en gevinst at kunne beregne en effektfaktor for et givet stof, idet en generel arbejdshypotese er, at ”dårlige” data er bedre end ingen data. Det skal dog også tages med i betragtningen, at QSAR-vurderinger - foruden den indbyggede usikkerhed - automatisk tillægges den højest mulige vurderings- eller sikkerhedsfaktor, hvilket betyder at sådanne stoffer kan få en afgørende betydning i en samlet vurdering. Dette er et naturligt element i forskellige former for risikovurderinger, men i LCA kan for meget ”støj” besværliggøre tolkningen af en samlet vurdering. Hvis QSAR-vurderinger inddrages i væsentlig grad i UMIP, bør dette derfor følges op af et sæt retningslinier, der beskriver hvordan tolkning og rådgivning, specielt til virksomheder uden toksikologisk eller økotoksikologisk ekspertise, kan gennemføres bedst muligt.

Der kan ikke på baggrund af den meget summariske introduktion til QSAR peges på specifikke modeller, der er specielt anvendelige til formålet. QSAR-området udvikler sig meget hurtigt, hvilket udmønter sig i både forfining af eksisterende modeller og udvikling af nye. Hvis datagrundlaget ønskes suppleret ved hjælp af QSAR må det forventes, at et af projektets første opgaver er at udvælge de modeller eller kombinationer, der på det givne tidspunkt vurderes at give den bedste kvalitet af de parametre, der ønskes bestemt.

Udviklingen på QSAR-området betyder også, at mange af de QSAR-vurderinger, der findes i IUCLID, kan gøres mere præcise med de modeller, der er til rådighed i dag. Ved et eventuelt automatiseret udtræk fra IUCLID vil det derfor være hensigtsmæssigt at erstatte gamle QSAR-vurderinger med nye, idet QSAR vurderinger under alle omstændigheder må anses for at være den sidste udvej ved beregning af effektfaktorer, hvis der ikke findes toksikologiske og økotoksikologiske undersøgelser af acceptabel kvalitet.

# 4 Beskrivelse og vurdering af alternative metoder til at lave opgørelser (*Inventories*) for kemikalier

## 4.1 Indledning

Produktion af kemikalier foregår ofte i komplicerede procesanlæg, hvor kemiske reaktioner, separationsprocesser, varme og køleprocesser finder sted i et optimeret samspil. Derfor er det også naturligt, at der i forbindelse med udvikling af kemiske procesanlæg og ved senere optimeringer anvendes analyseværktøjer (simuleringsværktøjer), som kan håndtere de problemstillinger, der opstår i de komplekse systemer, hvor ressourcer i form af energi og råvarer omsættes og genvindes.

I LCA sammenhæng er der inden for de seneste år udviklet metoder, der er rettet mod "Environmental assessment" af kemiske processer. Et væsentligt element i LCA er udarbejdelse af opgørelser. Disse kan – specielt for stærkt integrerede processer – være svære at udarbejde. Antallet af ind- og udgående processtrømme kan være stort, og sammensætningen kan være vanskelig eller umulig at måle direkte. Metoder for systematiske LCA-opgørelser baseret på masse og energibalancer er foreslået (f.eks. Jimenez-Gonzales, 2000).

En række metoder inkluderer LCA principper i et optimeringssystem (f.eks. Pistikopoulos og Stefanis, 1998). Tilsvarende har de amerikanske miljømyndigheder udviklet den såkaldte WAR algoritme (Cabezas 1999), som karakteriserer flowene og de potentielle miljømæssige konsekvenser ved en kemisk proces. I WAR algoritmen benyttes ni påvirkningskategorier, som går fra globale belastninger som f.eks. bidrag til nedbrydning af ozonlaget til lokale belastninger som f.eks. human toksikologi. Bidraget til påvirkningskategorierne beregnes ud fra de udgående processtrømmes kemiske sammensætning. Da processimulatorer er i stand til at beregne disse sammensætninger under alternative driftsforhold, vil det derfor være muligt at indarbejde påvirkningskategorier umiddelbart. I det omfang, de forskellige påvirkningskategorier kan vægtes, vil det umiddelbart være muligt at anvende optimeringsalgoritmer, der systematisk kan optimere en given kemisk produktion.

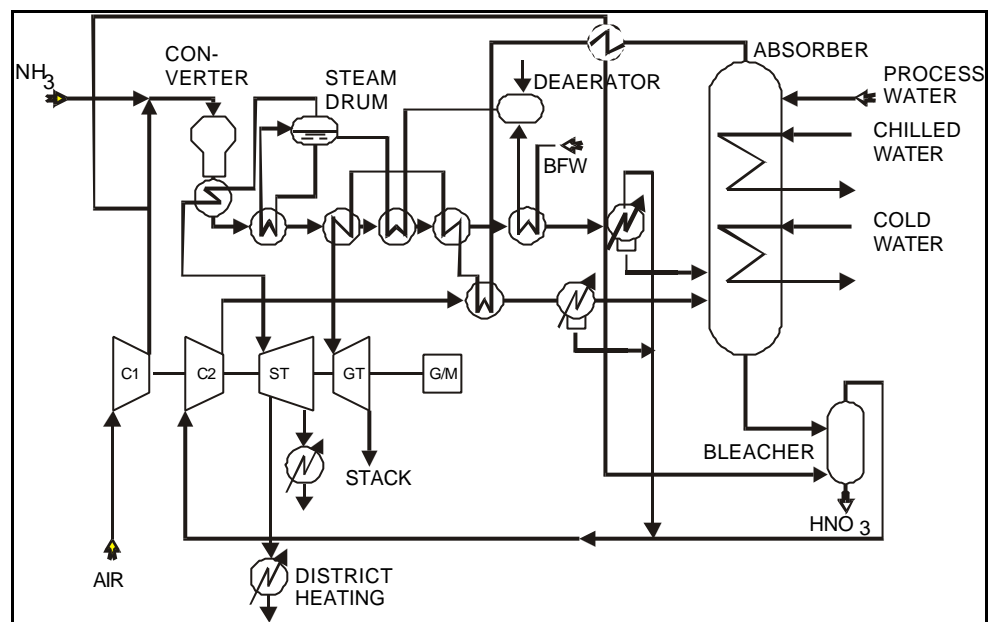
I det følgende er nogle af de væsentligste simulerings- og optimeringsmetoder, som traditionelt har været anvendt til analyse og optimering af kemiske processer, gennemgået. Ligeledes er der eksempler på, hvorledes værktøjerne i praksis anvendes og illustrationer af, hvorledes de samme værktøjer kan anvendes i LCA-sammenhæng.

For at illustrere mulighederne for anvendelse af processimulering til udarbejdelse af LCA opgørelser vil et eksempel på produktion af salpetersyre indledningsvis blive gennemgået.

## 4.2 Opgørelse ved forskellige processer til salpetersyreproduktion

Salpetersyre hører til blandt verdens mest producerede kemikalier. De grundlæggende mekanismer (reaktionsforløb) til produktion af salpetersyre har ligget fast de seneste 50 år. Alligevel er der mange muligheder for at tilpasse og optimere processen ud fra forskellige kriterier. Der findes således på verdensplan salpetersyreanlæg med vidt forskellige ydelser med hensyn til konverteringsgrad, energieffektivitet og emissionsforhold. Figur 1 er et eksempel på et moderne salpetersyreanlæg. Det skal bemærkes, at det kun er hovedstrømmene, der er medtaget på diagrammet. Udover de viste komponenter er der et stort antal pumper og ventiler.

Figur 1. Eksempel på moderne salpetersyreanlæg.



I processen omsættes ammoniak (NH<sub>3</sub>) til salpetersyre (HNO<sub>3</sub>) i tre trin:

1. Ammoniakforbrænding, hvor ammoniakken reagerer med ilt under dannelse af NO. Reaktionen foregår katalytisk ved hjælp af en platinholdig katalysator.
2. Oxidering af NO med ilt til NO<sub>2</sub>.
3. Reaktion og absorption af NO<sub>2</sub> og vand til dannelse af salpetersyre (HNO<sub>3</sub>)

Alle tre reaktioner er varmeafgivende (exoterme). Det betyder, at der samlet frigives store energimængder i processerne. For at de enkelte reaktionstrin kan finde sted med tilstrækkelig omsætningsgrad og reaktionshastighed, er der krav til temperaturer og tryk. Således vil ammoniakforbrændingen (reaktion 1) have størst omsætningsgrad ved høj temperatur, NO oxidationen (reaktion 2) foregå hurtigst under afkøling og salpetersyreabsorptionen foregå bedst ved højt tryk og lav temperatur.

De specifikke forhold for reaktionerne er i høj grad afhængig af de ydre omstændigheder som f.eks. råvarepriser, energipriser og miljøkrav. Typisk vil det endelige design være underlagt et trade-off mellem bl.a. energiudgifter og anlægsinvestering.

I forbindelse med udarbejdelse af opgørelser til brug i LCA antages de væsentligste parametre at være:

- Ammoniakforbrug
- NO<sub>x</sub> emission
- Vandforbrug
- Energiforbrug/overskud

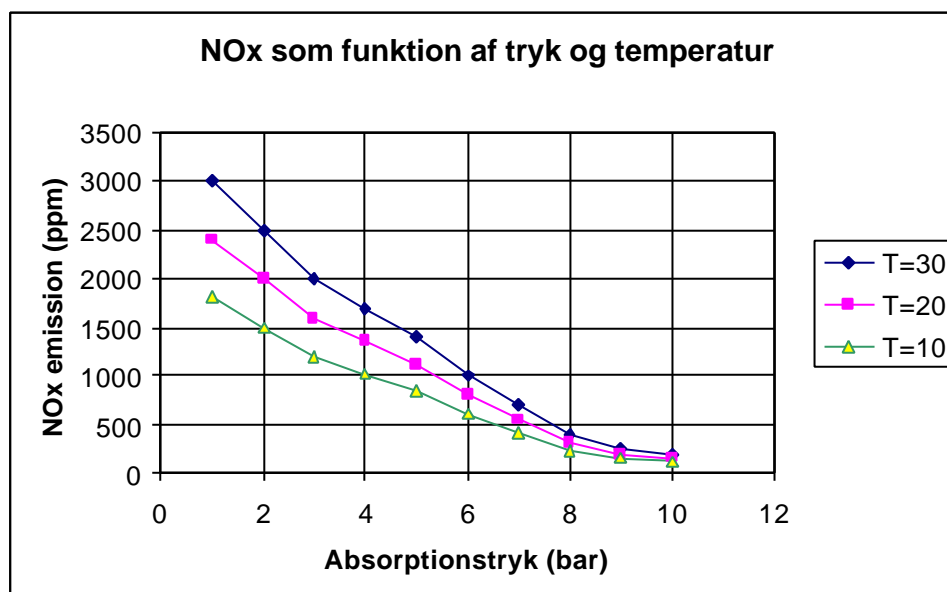
#### 4.2.1 Ammoniakforbrug

Det specifikke ammoniakforbrug hænger primært sammen med effektiviteten af forbrændingen. Under forbrændingen omsættes ammoniak fortrinsvis til NO (primær reaktion), mens en lille del omsættes til kvælstof og vand (sekundær reaktion). Derfor giver højere konverteringsgrad (primær reaktion) mindre ammoniakforbrug.

#### 4.2.2 NO<sub>x</sub> emission

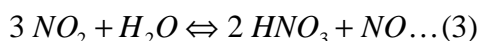
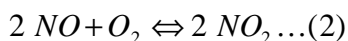
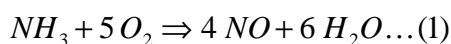
NO<sub>x</sub> emissionen er primært afhængig af tryk og temperatur under absorptionen. Højere tryk og lavere temperatur giver mindre NO<sub>x</sub> i restgassen, som emitteres. Det skyldes, at omdannelse af NO<sub>2</sub> og vand til salpetersyre er en ligevægtsreaktion. Sammen med gas-/vandfase ligevægten bestemmer ligevægtsreaktionen den aktuelle mængde NO<sub>x</sub> i restgassen (Figur 2).

Figur 2. Ligevægtsberegning for NO<sub>x</sub> koncentration i restgassen i et salpetersyreanlæg (ved 10, 20 og 30 °C).



#### 4.2.3 Vandforbrug

Vandforbruget til salpetersyreproduktion er stort set fastlagt på forhånd, jvf. reaktionsforløbet



NO gassen recirkuleres således, at den samlede reaktion er:



hvilket giver en teoretisk salpetersyre koncentration på 78% (vægt). I praksis produceres der salpetersyre med en koncentration på typisk 65% (vægt). Det betyder, at der teoretisk skal tilføres 0.25 tons vand for hver produceret tons salpetersyre (omregnet ren salpetersyre).

#### 4.2.4 Energiforbrug

Mens de øvrige parametre (ammoniak,  $NO_x$  og vand) primært er afhængige af enkelte enhedsoperationer, er energiforbruget afhængig af samspillet mellem de enkelte enhedsoperationer.

Da alle reaktionerne i processen er exoterme, er processen grundlæggende energiproducerende. Den samlede energimængde, der frigives ved reaktionerne, er ca. 1800 kWh/ton syre. Hvis man ser på det udnyttede energioverskud fra reelle processer, varierer dette typisk fra under 0 til 300 kWh. Energioverskuddet omsættes typisk til dampproduktion.

#### 4.2.5 Opgørelser for salpetersyreproduktion

I Tabel 23 er opgørelser for en række procesanlæg vist. Procesanlæggene er dels eksisterende anlæg og dels simulerede anlæg. For de eksisterende anlæg er data baseret på konkrete anlægsdata og verificeret ved simulering (energi og stofbalancer) (Nielsen, 1995). Herudover er der medtaget to procesanlæg, som ikke er bygget. Det første af dem er et konventionelt anlæg tilbudt af en udbyder af procesanlæg (Contractor). Det sidste anlæg er et konceptstudie med et anlægskoncept udarbejdet af dk-TEKNIK (Nielsen og Hansen, 1995 og 1997). For Contractor processen er data opgivet direkte fra udbyderen og herefter verificeret ved simuleringer. For dk-TEKNIK's proces er opgørelsen lavet udelukkende på baggrund af simuleringer af processen.

Det væsentligste at bemærke ved opgørelserne i Tabel 23, er de store forskelle mellem de bedste og de dårligste anlæg. Det er derfor vigtigt ved LCA opgørelser at vide hvor produktet kommer fra. Det bemærkes iøvrigt, at de væsentligste forbedringer ved fremtidige anlæg opnås gennem højere energieffektivitet.

Tabel 23 Opgørelse for forskel i lige salpetersyreanlæg per produceret tons salpetersyre.

Parameter	60'er anlæg	70'er anlæg	80'er anlæg	EFMA BAT	Contractor	dk-TEKNIK
Procestype	1 bar 3 bar	5 bar 10 bar	5 bar 10.5 bar		5 bar 11 bar	5 bar 11 bar
Inputs						
Ammoniak tons/tons	0.280	0.282	0.283		0.280	0.280
Luft tons/tons	3.36	3.96	5.06		5.10	5.10
Vand tons/tons	0.266	0.263	0.265		0.265	0.545
Produkt						
Salpetersyre tons/dag	225	450	650		1150	1150
Dampeksport	0.07	0.11	0.80		0	0
Elforbrug	22.5	25.2	25.0		-198.3	-247.8
Energi <sup>1</sup> kWh/tons	-5	-3	-159.2		-198.3	-247.8
Emissioner						
NO <sub>x</sub> ppm	1000	100	80	100	80	80
NO <sub>x</sub> kg/tons	4.27	0.43	0.34	0.65	0.34	0.34

<sup>1</sup> Energi overskud ved salpetersyreproduktion omregnes til ækvivalent elproduktion.

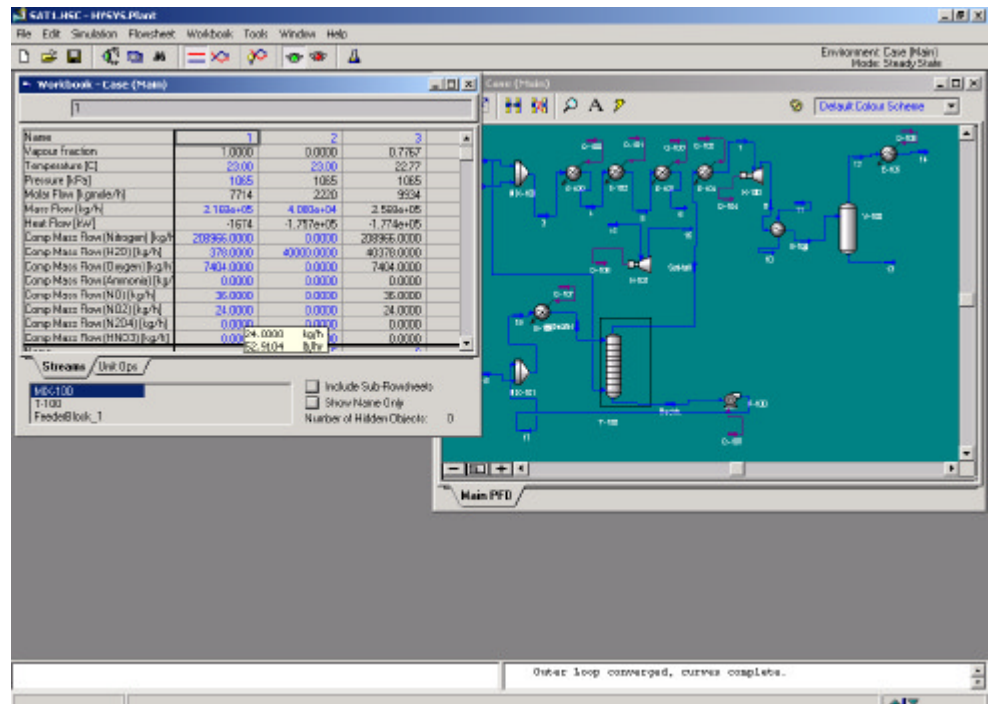
Det skal nævnes, at de to sidste (virtuelle) procesanlæg er baseret på energioptimeret design. Det er således ikke nødvendigvis de anlæg, der bygges i dag. Den endelige proces er baseret på et trade-off mellem de forskellige størrelser.

Med hensyn til fremskaffelse af de aktuelle procesdata til udarbejdelse af opgørelser vil processimulering ofte være et uundværligt værktøj. Det gælder specielt processer med emissioner, der enten ikke kan måles eller er meget bekostelige at måle. Her vil modeller baseret på energi og massebalancer samt ligevægtsforhold kunne give oplysninger om størrelser, som ellers ikke vil være tilgængelige.

Herudover vil det generelt for større procesanlæg være særdeles tidsbesparende at benytte sig af processimulering ved udarbejdelse af opgørelser. Udover en systematik i datahåndteringen er man sikker på, at de data, man anvender, er konsistente hvad angår de primære masse- og energibalancer. Herudover vil man med en simuleringsmodel let kunne udarbejde reviderede opgørelser på baggrund af ændrede procesbetingelser.

Figur 3 viser et uddrag af en simuleringsmodel for salpetersyreprocessen. Ved anlægssimuleringer vil man umiddelbart se konsekvenserne i form af energiforbrug, emissioner og ressourceforbrug ved ændrede driftsbetingelser. Simuleringsmodellen kan således bruges interaktivt til optimering af processen og minimering af emissioner. I Tabel 24 ses de procesmæssige udledninger, som simuleringsmodellen beregner.

Figur 3 Uddrag af simuleringsmodel for salpetersyreanlæg.



For hver processtrøm kan der uddrages alle fysiske og termodynamisk beregnede størrelser.

Tabel 24. Sammensætning af restgas, som uledes fra skorsten.

Processtrøm		Restgas til skorsten
Tryk	Bar	1.05
Temperatur	C	85
Massefylde	kg/m <sup>3</sup>	0.992
Komponentflow N <sub>2</sub>	kg/h	104483
Komponentflow H <sub>2</sub> O	kg/h	189
Komponentflow O <sub>2</sub>	kg/h	3702
Komponentflow NH <sub>3</sub>	kg/h	0
Komponentflow NO	kg/h	18
Komponentflow NO <sub>2</sub>	kg/h	12

I arbejdet med udarbejdelse af de i Tabel 23 udarbejdede opgørelser har det således været forholdsvist enkelt at tilpasse generelle modeller til specifikke formål.

#### 4.3 Anvendelsesområder for processimulering i LCA perspektiv

Generel anvendelse af simulerings- og optimeringsværktøjer bliver i stigende omfang anvendt til udvikling og forbedring af kemiske processer. Fra starten af 60'erne, hvor de første computerbaserede analyseværktøjer blev udviklet, var de væsentligste mål at kunne lave simuleringer af enkelte kemiske enhedsoperationer. I forbindelse med computernes udvikling blev det muligt at foretage simuleringer af flere koblede enhedsoperationer. I løbet af 70'erne udviklede en række større industrivirksomheder specialiserede simulatorer. Disse kunne gennemføre beregninger, der hidtil havde været særdeles tidskrævende, på processerne. Simulatorerne blev udviklet af større



industrikoncerner som Union Carbide, Exxon m.fl. Også enkelte danske virksomheder opbyggede simulatorer for kerneprocesserne, f.eks. De Danske Sukkerfabrikker (nu Danisco Sugar). Sideløbende med de virksomhedsspecifikke simulatorer begyndte de første kommercielle generelle processimulatorer at dukke op sidst i 70'erne. Fælles for såvel de virksomhedsspecifikke som for de generelle simulatorer var det, at de stillede store krav til brugerne.

I løbet af 80'erne blev simulatorerne udviklet yderligere, og der begyndte at komme værktøjer målrettet til optimering af kemiske processer.

I 90'erne var udbredelsen af simulatorerne forholdsvis stor, hvilket i høj grad skyldes, at de blev væsentligt lettere tilgængelige. Udbredelsen af optimeringsværktøjer har ikke været lige så stor som udbredelsen af de generelle simuleringværktøjer. Disse værktøjer stiller stadig store krav til brugerne.

Anvendelsen af simulering- og optimeringsværktøjer i dag sker bl.a. til:

- validering af målte procesdata, beregning af ikke målbare data,
- optimering af udbytte,
- energioptimering, f.eks. optimering af varmegenvinding,
- risikovurderinger, f.eks. simuleringer af konsekvenser ved fejlfunktion,
- beregning og minimering af emissioner,
- udvikling af nye kemiske stoffer.

Udviklingen af værktøjer er primært sket for at dække et stadigt stigende behov for at øge produktiviteten og minimere driftsomkostninger og anlægsudgifter. Dette har været en bydende nødvendighed specielt i kemiske procesanlæg, som ofte er meget kapitaltunge og har store driftsomkostninger.

De miljømæssige aspekter er traditionelt behandlet som restriktioner i procesoptimeringen. Det vil sige, at optimeringen er gennemført under hensyntagen til en række af krav, der skal opfyldes (f.eks. lovmæssige restriktioner på udledninger af VOC'er).

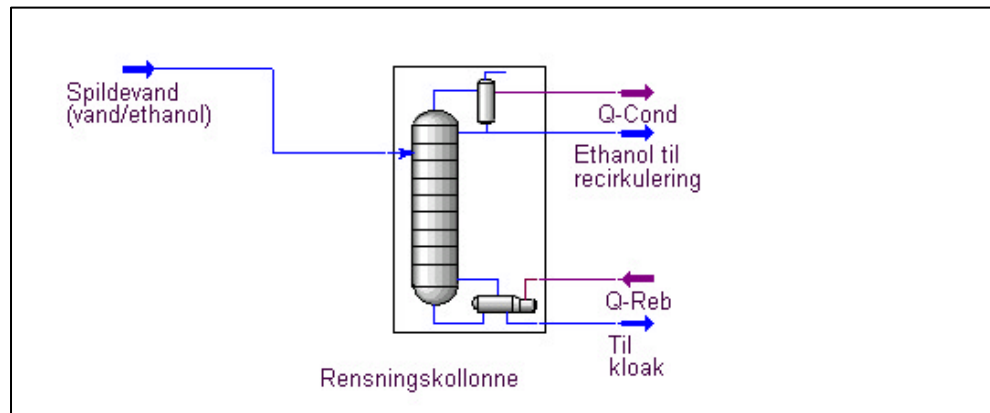
Mange af værktøjerne kan dog umiddelbart anvendes til at inddrage miljøaspektet direkte i optimeringerne. Bl.a. har energiforbruget i mange år spillet en central rolle i den kemiske industris konkurrenceevne. Derfor vil der i forbindelse med etablering af nye kemiske procesanlæg næsten altid blive taget specifikt fat på energiforholdene. Med hensyn til de øvrige miljømæssige forhold inddrages disse i højere grad i planlægningen af procesanlægget. Ofte er realiteten, at miljøforholdene er tæt knyttet til energiforholdene, således at en stor omsætning af energi ofte udmønter sig i store emissioner.

I LCA sammenhæng vil analyseværktøjer specielt kunne bidrage ved indsamling af data for processer, der ikke er fuldt dokumenteret. En række af de værktøjer, der typisk anvendes, er således velegnede til opstilling af konsistente energi- og massebalancer, hvori der tages hensyn til de enkelte kemiske forbindelsers fysiske egenskaber.

Værktøjerne vil – når tiden er moden – også kunne bringes i anvendelse til "LCA baseret optimering". Med det forstås en optimering, som producenterne kan foretage i forsøget på at opnå en bedre "LCA-ydelse".

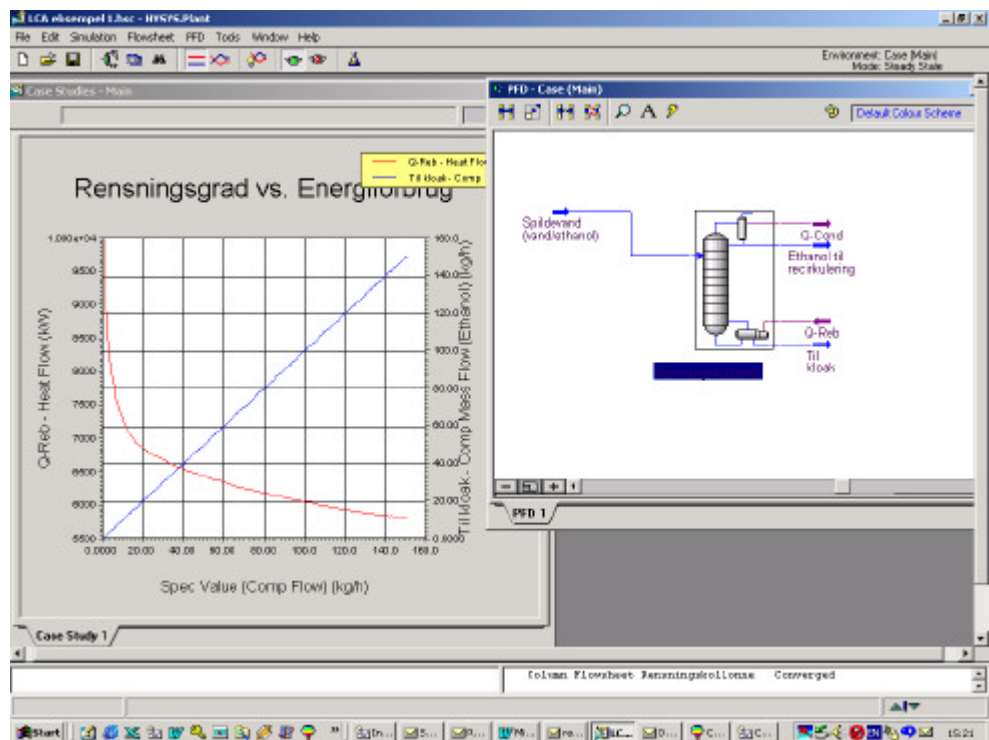
Som et eksempel betragtes en spildevandsrensningsproces, hvor der anvendes energi til regenerering af spildevandets kontaminering. I eksemplet er der simuleret et system med sprit (ethanol) i vand. Spildevandet renses ved en destillation (Figur 4), hvor der anvendes energi i en reboiler.

Figur 4 Model for destillationskolonne til rensning af spildevand.



Jo mere energi, der tilføres, jo mere sprit kan der sendes tilbage til processerne. I simuleringmodellen kan denne sammenhæng undersøges ved at variere på designparametrene. I dette eksempel opsamles samhoørende værdier for spritindhold i spildevandet og energiforbruget (Figur 5).

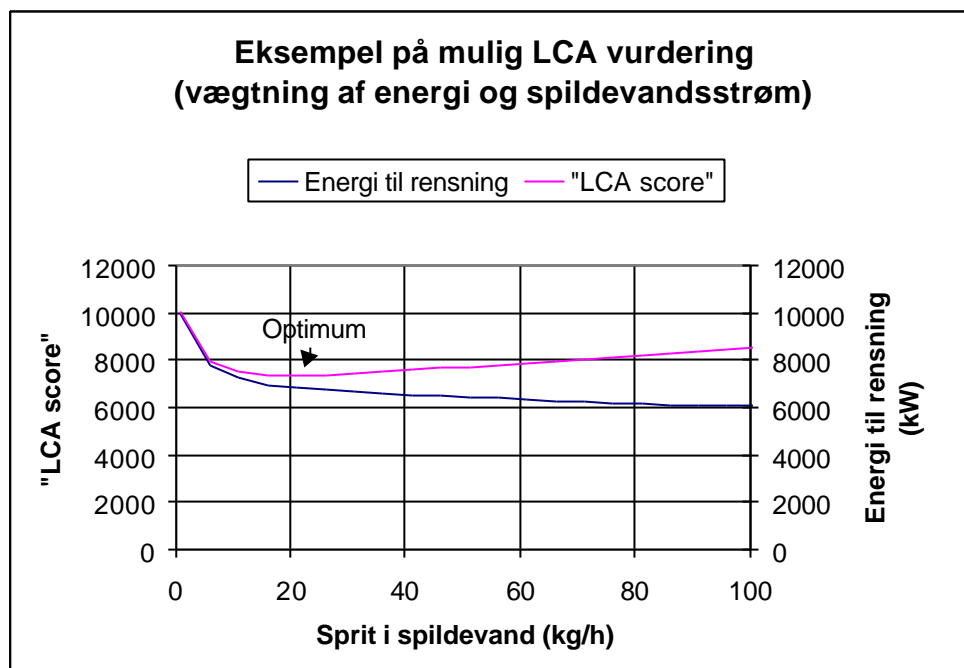
Figur 5 Brug af simuleringmodel til systematisk afvejning af procesparametre.



Såfremt det er muligt at vægte de enkelte LCA parametre, vil det således være muligt – ved hjælp af simuleringværktøjet – at finde det design, der ud fra en livscyklusbetragtning er bedst.

Ved at tillægge de enkelte parametre en "LCA-vægtning" er der i eksemplet foretaget en simpel optimering, der angiver den optimale designkonfiguration af rensningsprocessen (Figur 6).

Figur 6 Optimering af "LCA ydelse". På baggrund af simuleringer kan der findes et optimum baseret på vægtning af energiforbrug og sprit i spildevand.



Eksemplet viser en simpel simulering og optimering, hvor der optimeres på nogle få driftsparametre. Det er derfor relativt nemt og overskueligt at finde et "LCA optimum". I reelle kemiske processer vil der være betydeligt flere driftsparametre, som kan og skal indgå i optimeringen. Det betyder, at det næppe vil være tilstrækkeligt at anvende simuleringværktøjer. Der er også behov for at anvende egentlige optimeringsmetoder, som er i stand til systematisk at optimere frihedsgraderne i processerne.

#### 4.4 Processimulerings- og optimeringsværktøjer

Til den praktiske gennemførelse af processimulering og optimering findes en række computer baserede værktøjer. Som udgangspunkt kan disse værktøjer deles op i simuleringværktøjer og synteseværktøjer (værktøjer til optimering af procesdesign).

Simuleringværktøjer anvendes til at efterligne (beregne) virkelige processer (tilstandsvariable eller tidsforløb i procesvariable) og er ofte knyttet sammen med parameteroptimering.

Til dette kræves, at en række af procesanlæggets specifikationer og karakteristika er kendte/antaget og indført i de modeller (komponenter), som simulatoren indeholder. Simuleringværktøjer er velegnede til at undersøge og afprøve konsekvenserne af nye driftsstrategier eller operationer på et anlæg på en økonomisk hensigtsmæssig måde, idet det ikke kræves, at der står et virkeligt anlæg til rådighed, og der bruges ikke råstoffer udover arbejdstid.

Endvidere elimineres risici for uheld foranlediget af, at anlægget er kommet ud i et driftsområde, hvor garantien ikke gælder for anlægget.

Synteseværktøjer retter sig mod design af anlæg. Der kan her være tale om fastlæggelse af et overordnet systemdesign (konfiguration af systemet), eller designet kan bestå i fastlæggelse af de enkelte komponenters kapacitet og fysiske størrelse.

Syntese af anlæg (i betydningen fastlæggelse af det overordnede systemdesign) inddrager ofte komplekse problemstillinger, som udmynter sig i et væld af mulige designkonfigurationer.

Værktøjerne kan benytte matematisk programmering til at finde frem til en optimal konfiguration. En anden mulighed er anvendelse af heuristiske regler, som bygger på erfaringer og ræsonnementer, der gør det muligt at reducere antallet af teoretiske konfigurationer i en sådan grad, at det er muligt at overskue og undersøge de tilbageværende konfigurationer.

Den ovennævnte opdeling i simulerings- og synteseværktøjer er dog ikke reel i praksis, idet der ofte i simuleringsværktøjer er integreret en række synteseværktøjer, som kan assistere brugeren i fastlæggelsen af enkeltkomponenters specifikke design.

#### 4.5 Samspil mellem kendte og ukendte variable

Forudsætningen for en god LCA opgørelse er bl.a., at alle væsentlige ind- og udgående processtrømme for en produktionsproces er kendt.

For en lang række processer til fremstilling af kemiske produkter er forudsætningen, om at alle ind- og udgående strømme er kendt, langt fra opfyldt. En total kortlægning ved målinger og analyser af de ind og udgående strømme vil i mange tilfælde være særdeles omfangsrig og behæftet med væsentlige fejl. Ved produktion af forskellige produkter på samme procesanlæg, men med små driftsændringer, vil der være behov for at gentage målingerne i fuldt omfang.

Ved at benytte sig af processimulering – kombineret med målinger – vil det dels være muligt at lave opgørelserne væsentligt hurtigere og dels kunne give større datasikkerhed, da processimulatorerne sikrer at alle stof- og energibalancer er i overensstemmelse med de fysiske og termodynamiske love.

Såfremt en pålidelig processimuleringsmodel kan opstilles for en given produktionsproces vil det endvidere være muligt hurtigt og nøjagtigt at lave opgørelser for forskellige produktspecifikationer.

I praksis vil man for en given produktionsproces have opgørelse over en del af de ind- og udgående processtrømme. Simuleringsmodellen kan herefter bruges til at beregne de resterende data. Forudsætningen er at der er et tilstrækkeligt antal kendte størrelser. Da processimulatorer baserer sig på løsning af ligningssystemer skal der være overensstemmelse mellem antallet af ligninger og antallet af ubekendte størrelser. Hvis der er for få oplysninger er det nødvendigt at anvende antagelser, hvilket giver anledning til at usikkerheden på opgørelserne øges. Hvis der er færre ubekendte end ligninger har man en situation hvor systemet siges at være overbestemt. Det betyder at man har overskydende information. Her kan man vælge at anvende de

overkydende data til at checke om modellen og målinger stemmer overens. Såfremt målinger og balancer ikke stemmer kan man med statistiske metoder finde frem til, hvilke data der må antages at være mest troværdige. Jo mere systemet er overbestemt jo mere pålideligt bliver resultatet. Da målinger ofte kan være behæftede med væsentlige fejl anbefales det derfor altid at stræbe mod at få så mange målinger med som muligt.

#### 4.6 Værktøjer til processimulering.

##### 4.6.1 Simuleringsværktøjer til procesindustri

Der findes en række alternative produkter til processimulering rettet mod kemisk og beslægtet industri. Disse kan fordeles på kommercielle produkter og værktøjer udviklet til forskningsmæssig brug på universiteter.

Markedet for kommerciel processimuleringssoftware er domineret af tre store udbydere, som er:

- Aspen Technology med produktet ASPENPLUS
- AEA Technology med HYSYS
- Simulation Science med PRO VISION

Herudover er der en frodig underskov med talrige leverandører af generelle såvel som produktions-specifikke produkter.

For de generelle processimulatorer gælder, at de er designet til almene proces-tekniske beregninger og bygget op af en række standardkomponenter. En standardkomponent kan eksempelvis være en pumpe eller en varmeveksler. De enkelte standardkomponenters karakteristika er hver især beskrevet med et sæt ligninger. Simulatoren består endvidere af en beregningsdel (ligningsløser) og et interface (i dag typisk et grafisk brugerinterface).

Det grafiske brugerinterface og den komponentorienterede opbygning giver mulighed for direkte på en computerskærm at opbygge et procesanlæg af enkeltkomponenter forbundet og arrangeret som i virkeligheden, hvilket normalt øger forståelsen og overskueligheden. Der kan opbygges ganske præcise modeller (specielt hvis der er mulighed for at programmere/definere egne komponenter) af virkelige anlæg, hvor styrings- og regulerings-systemet også er inddraget.

Det er derfor muligt på ganske kort tid at opbygge en model af et procesanlæg, som kan simulere driften af et virkeligt anlæg, og som samtidig er ret let at overskue og forstå. Detaljer om processen kan specificeres i de enkelte komponenter, eller komponenterne kan evt. skræddersyes til specielle processer. Simulatorerne giver mulighed for at simulere stationære forhold såvel som dynamisk drift.

Når først en model af et procesanlæg er opbygget i en simulator, kan denne model anvendes, hver gang konsekvensen af at ændre noget i anlæggets drift ønskes undersøgt. Man kan vælge at fiksere nogle parametre, mens andre optimeres. Det kunne eksempelvis være ønsket om at minimere det specifikke brændselsforbrug i en proces uden at ændre på sammensætningen (kvaliteten) af produktet.

Oftentimes er det datagrundlag, som virksomhederne besidder om deres processer (endog egne kærneprocesser), noget mangelfuldt. Her vil en model af processen opbygget i en simulator normalt være til stor hjælp, hvis ukendte størrelser i processen ønskes estimeret eller beregnet. Visse centrale procesdata kendes normalt, idet de måles løbende af forskellige årsager.

Som et eksempel kan nævnes en proces, hvor træ tørres i et tørrekammer. I en sådan proces vil man typisk under tørreprocessen løbende måle vandindholdet i træet, som findes i tørrekammeret, idet dette er en central variabel, der skal ændres (nedbringes) i tørreprocessen. Processen kan kontrolleres ved at måle på og styre en række variable ved at regulere på andre variable. Styrevariable kan være temperatur og fugtindhold af tørreluft, der sendes ind i tørrekammeret, mens en variabel, der reguleres på, kan være damptilførsel.

En række parametre, som også har indflydelse på tørreprocessen, måles derimod ikke – enten fordi de ikke er så afgørende, eller fordi de ikke indgår som en parameter, der styres efter. Eksempelvis kan det tænkes, at varmekonsumet i form af damp ikke måles og dermed ikke registreres, men kun indgår som en variabel, der reguleres på.

Hvis tørreprocessen opbygges i en simuleringssmodel, vil dampkonsumet imidlertid kunne beregnes ud fra de registrerede måleværdier og er hermed et eksempel på, at datagrundlaget i en proces kan udbygges ved anvendelse af simuleringssmodeller af processen.

Med en god model af processen vil det ofte være muligt med ganske få målte eller kendte størrelser som inddata at fastlægge (beregne) hele processen med en simulator. Hvis den teoretiske model derimod er mere mangelfuld, er der behov for flere målte data til at fiksere modelberegningerne.

Simulatoren kan dermed bruges til at beregne en lang række tilstandsstørrelser i processen, som enten ikke kan måles eller er for dyre at måle.

En processimulator er et værdifuldt og effektivt værktøj til at udbygge et mangelfuldt datagrundlag i procesindustrier, hvilket kan være yderst relevant i forbindelse med udarbejdelse af LCA opgørelser.

En af de førende udbydere af processimulerings- og optimeringssoftware er Aspen Technology, som udbyder et væld af produkter. Der er udover den generelle processimulator ASPENPLUS, en række mere specifikke simulatorer og synteseværktøjer som kan integreres med hinanden.

Udover simulatorer og optimeringsværktøjer i mere traditionel forstand til procesindustrien er der på det seneste fremkommet produkter til optimering på et mere overordnet plan, ved udnyttelse af informationer tilgængelige online. I princippet er der ingen begrænsning i, hvilke informationer der her kan gøres brug af til optimering af en produktion, f.eks. så den kan køre meget tæt på, hvad der er økonomisk optimalt. Information om råvarepriser og kvalitet fra forskellige leverandører er et eksempel herpå, hvor en processimulator vil kunne udregne konsekvenserne af at omstille og optimere procesanlægget til en anden kvalitet af råvare og dermed finde frem til den leverandør og råvare, der er mest fordelagtigt i øjeblikket.

Aspen Technology har sammensat nogle pakkeløsninger (Aspen Manufacturing Suite, Aspen Engineering Suite™ og Aspen eSupply Chain Suite). Disse blokke kan kommunikere med hinanden, så de udgør et totalsystem til styring og optimering af alle faser indenfor en produktionsvirksomhed, fra indkøb af råvarer over produktionsprocessen til salg og distribution af færdigvarer.

Firmaets fokusering på e-business området skal ses i sammenhæng med den voldsomme vækst i internettets udbredelse og dermed mulighed for at få adgang til meget omfattende og opdaterede data, både internt i verdensomspændende koncerner og mellem samhandlende virksomheder.

Aspen Technology har integreret sin procesviden med internettet med det mål at blive førende indefor internetbaserede produktions og supply-chain optimeringsværktøjer til procesindustrien.

En sådan udvikling i retning af løbende at kunne håndtere dugfriske oplysninger om næsten alt af relevans for en produktion og straks om muligt tilpasse produktionen, kan på lang sigt have store perspektiver, idet det kan give mulighed for løbende at anvende LCA i minimeringen af den samlede miljøbelastning i forbindelse med en given produktion. Økonomi kan kobles på ved også at anvende LCA i reguleringen af miljøafgifter.

Ligesom Aspen Technology fokuserer også AEA og Simulation Science på pakkeløsninger med bl.a. supply chain management, optimering, regulering m.m.

Der findes et væld af ikke-kommercielle simulatorer i universitetssektoren, heriblandt en par danske eksempler:

- DNA (Dynamisk netværks analyse), Institut for Energiteknik, DTU
- ICAS (Integrated Computer Aided System) fra CAPEC (Computer Aided Process Engineering Center), Institut for Kemiteknik, DTU

De forskningsbaserede værktøjer er ofte lige så nøjagtige, som de kommercielle værktøjer. Endvidere vil de ofte være billige eller endog gratis at erhverve. I praksis lider programmerne dog af at være svært tilgængelige ligesom stabiliteten sjældent er stor.

En væsentlig grund til, at der er og fortsat bliver udviklet mange simulatorer i universitetsmiljøet, er at man her er interesseret i at have fuld adgang til kildeteksten, så simulatoren kan skræddersyes til specifikke opgaver.

#### 4.6.2 Dataindhold

Dataindholdet til en simulator er i overvejende grad bestemt af formålet og dermed detaljeringsgraden samt arten af analysen, og i mindre grad af hvilken specifik software der anvendes til analysen. Eksempelvis vil de førnævnte tre generelle processimulatorer typisk skulle have de samme informationer om processen og anlægskomponenter for at kunne simulere samme driftssituation af anlægget.

Forskelle i indata kan bero på at de i simulatoren integrerede designværktøjer er forskellige i omfang og detaljeringsniveau, og at der anvendes forskellige metoder til løsning af ligningssystemet.

Eksempel: En varmeveksler kan specificeres ud fra temperaturer før og efter varmeveksleren og massestrømme af de to medier der indbyrdes udveksler varme i komponenten. Ud fra varmfylderne ( $C_p$ -værdier) af de to medier (der typisk er tilgængelig via en stofdatabase med beregningsrutiner), kan størrelsen af varmeveksleren ( $UA$ -værdi) bestemmes.  $A$  udtrykker arealet af det varmeoverførende areal og  $U$  er en størrelse der udtrykker hvor effektiv varmeoverførelsen skal være. Dimensioneringen af varmeveksleren er her foretaget på et termodynamisk (energi- og temperaturmæssigt) niveau.

Et mere detaljeret niveau er hvor bl.a. også de strømningstekniske forhold i varmeveksleren indgår i beregningerne af varmoveførelse ( $U$ ). Til dette kræves adgang til flere stofegenskaber for de to varmevekslende medier så som viskositet, varmeledningsevne, emissionsforhold, densitet m.m. samt kendskab til geometri og materiale af varmevekslerens strømningsskanaler.

I relation til LCA vil et af de væsentligste formål med simulering af en proces være at kunne opstille en energi- og massebalance for systemet, for at kunne fastlægge de primære (direkte) behov for energi og råvarer til opretholdelse af en produktion.

I anden række kan en fastlæggelse af anlæggets detaljerede design bruges til fastlæggelse af afledte ressourceforbrug, der medgår til fremstilling af selve anlægget.

Endelig vil simulering kunne bruges i verifikation og dokumentation af nye alternative fremstillingsprocesser.

#### 4.6.3 Datakrav, dataoutput, pålidelighed og præcision

Omfanget og præcisionskravene til datagrundlaget afspejles af formålet med simuleringen af en proces. Således vil syntese, design og økonomisk optimering af et procesanlæg kræve et betydeligt mere omfattende datagrundlag end en procesberegning (simulering), der blot har til formål at fastlægge energi- og massebalance.

Pålideligheden af en beregning afhænger dels af pålideligheden af inddata, dels af modellens evne til at beskrive virkeligheden og endelig af præcisionen, hvormed ligningsløseren løser ligningssystemet.

Det er klart, at kvaliteten af inddata er afgørende for hvor god en løsning – selv med en god model – der kan opnås. Dette følger devisen: *garbage in – garbage out*.

Hvis målinger af centrale inddata ikke er nogenlunde i overensstemmelse med virkeligheden, er der derfor stor risiko for at resultatet af simuleringen heller ikke stemmer blot nogenlunde overens med virkeligheden.

Ligeså afgørende for kvaliteten af en løsning er det, at modellen i simulatoren beskriver de forhold, der ønskes undersøgt, på en måde, der stemmer godt overens med virkeligheden. Ved udarbejdelsen af en model må man tilpasse detaljeringsgraden under hensyn til behov, beregningstid, tilgængelighed af data, og teoretisk indsigt.



Her er en god model en model, der giver de nødvendige svar med tilstrækkelig præcision, med så få og lettilgængelige inddata som mulig og med mindst mulig beregningsarbejde.

Præcisionen på en beregning afhænger af flere typer af fejlkilder. Der er fejlkilder/tilnærmelser i selve den teoretiske model, der er usikkerheder/fejl på måledata og øvrigt datagrundlag, og endelig er der den numeriske præcision, hvormed et problem bliver løst af ligningsløseren.

Den numeriske præcisionen på en beregning, dvs. hvor tæt den numeriske løsning ligger på den sande løsning af det opstillede teoretiske problem, kan i mange simulatorer justeres manuelt. Der gælder ofte, at jo bedre præcision, desto længere tid tager beregningerne. I visse problemer, eksempelvis hvis der recirkuleres processtrømme, kan det være vanskeligt at nå frem til en løsning, der opfylder meget høje præcisionskrav. Normalt vil det dog være sådan, at fejlen på den numeriske løsning er langt mindre end de fejlkilder og usikkerheder, der er mellem den teoretiske model og den virkelige og usikkerheden på de målte inddata.

Ved processer, som er velkendte, og hvor der i lang tid har været anvendt processimulering i optimeringer, er der et godt erfaringsgrundlag for, hvorledes processen skal modelleres (modelopbygning) for at de teoretiske beregninger stemmer godt overens med praksis. I denne type af procesindustri kan man derfor forvente høj præcision og troværdighed af resultaterne, hvor usikkerheden hovedsagelig relaterer sig til usikkerheden på målte inddata. Dvs. her kan man i bedste fald forvente usikkerheder ned til en størrelse omkring 1%.

I andre procestyper, hvor erfaring med modellering er sparsom, kan der imidlertid være betydelig større usikkerhed på resultater.

#### 4.6.4 Priser

For de kommercielle processimulatorer og specialværktøjer til syntese og optimering gælder at priserne afspejles i markedet for denne type af produkter. Det totale produktsalg kan typisk opgøres i nogle få hundrede enheder eller mindre. Priserne på produkterne vil derfor være ganske høje, for at de ret store udviklingsomkostninger kan dækkes.

Det høje prisniveau implicerer en reduktion af det potentielle marked og virker dermed selvforstærkende.

Til de meget omfattende og komplette simuleringspakker er køberne derfor primært internationale kemikoncerner, konsulentvirksomheder med speciale i processimulering eller universiteter, der ofte får programmerne stillet til rådighed på en ikke-kommerciel, undervisningsbaseret licensaftale til favorable priser.

Som eksempel på priser kan nævnes at HYSYS Proces (processimulator der kan foretage statisk men ikke dynamisk simulering) koster cirka 25 000 \$ som et engangsbeløb i erhvervelse. Løbende opdateringer af programmet kan fås ved oprettelse af en licensaftale, hvor der betales et årligt beløb på omkring 15-20% af grundprisen for programmet dvs. i dette tilfælde omkring 4-5000 dollars om året.

Fra samme softwareudbyder kan synteseværktøjet HX-NET (værktøj til syntese og design af varmevekslernetværk) fås for omkring 15 000 \$.

Prisen på AspenTechs processimulator er noget højere end HYSYS Process.

Andre simulatorer og synteseværktøjer kan være meget billige eller evt. gratis – men i en del tilfælde er brugen af denne type produkter begrænset med en restriktion om at de ikke må anvendes i professionel eller kommerciel sammenhæng.

#### 4.6.5 Oplæringstid i brug af simuleringsværktøjer og synteseværktøjer.

Mange simuleringsværktøjer er beskrevet, så de kan anvendes med blot ganske få dages træning. For at kunne arbejde effektivt tidsmæssigt med processimulatorer kræves dog normalt betydeligt længere tid. Kun hvis brugeren har almen erfaring i brugen af andre processimuleringsværktøjer vil det sandsynligvis være tilstrækkeligt med få dages træning.

Årsagen til den vanskelige indlæring er primært, at simuleringsystemerne er komplicerede. Det skal nævnes at der ved blot simple processimuleringer, som f.eks. det indledende eksempel på rensning af sprit fra spildevand, let kan være flere hundrede variable og et tilsvarende antal ligninger, der skal løses. Så, selvom udviklerne af de kommercielle simuleringsværktøjer har gjort sig store anstrengelser med at pakke ligningsløserne godt ind, er det i mange tilfælde meget vigtigt for brugeren af simuleringsystemerne at have et godt kendskab til hvordan ligningsløserne fungerer. For de ikke-kommercielle værktøjer er dette problem som regel endnu mere udtalt. Her er systemerne ofte udviklet af et få antal personer til primært egne forskningsmæssige formål.

Udover en forholdsvis lang indlæringstid for brugere uden forudgående erfaring kræves det også at brugeren benytter simuleringsprogrammerne med jævne mellemrum. Det skyldes at programmerne indeholder temmelig mange detaljer.

For at kunne simulere og beskrive en proces realistisk er det endvidere en stor fordel at man har et godt kendskab til både den grundlæggende proces, simulatoren samt almen simuleringserfaring, for at kunne foretage nødvendige genveje uden at miste troværdigheden af simuleringsresultatet.

For anvendelse af egentlige optimeringsprogrammer (synteseværktøjer) er det om muligt endnu mere nødvendigt at have en forholdsvis stor indsigt i programmernes virkemåde. Disse værktøjer er i mange tilfælde udviklet til specifikke formål, hvilket kan give anledning til problemer når de forsøges anvendt til generelle formål. Derfor er anvendelse af synteseværktøjer i industrien forholdsvis begrænset.

Der er i øjeblikket to trends, der kan have stor indflydelse på antallet af brugere. Den første er, at primært simulatorerne - men også synteseværktøjerne - bliver udvidet med endnu flere detaljer. Det gør det muligt at gennemføre endnu mere detaljerede analyser, men betyder samtidig også, at programmerne for ikke-trænede brugere bliver endnu mere uoverskuelige. Den anden trend er, at de indbyggede ligningsløserne bliver mere robuste, hvilket alt andet lige vil gøre det lettere for nye brugere at gøre brug af værktøjerne.

Det skal sluttelig pointeres, at når man har opnået fortrolighed med processimulatorerne, så kan der opnås store tidsmæssige besparelser ved at anvende disse – f.eks. ved opgørelser til LCA. Denne fordel er specielt udtalt hvis man arbejder med snært beslægtede industrielle processer.

## 5 Vurdering af kemikaliers betydning i forskellige faser af livscyklus

Dette afsnit giver fire eksempler på potentielle miljøeffekter ved fremstilling, brug og bortskaffelse af kemikalier. Kemikalierne, der indgår i vurderingen, er nævnt herunder med angivelse af begrundelsen for valget:

- *Styren til polystyren* - relativt højt energiforbrug i produktionsfasen, et mellemstort effektpotentiale og minimale udledninger i brugs- og bortskaffelsesfasen.
- *Ethanol* - relativt lavt energiforbrug i produktionsfasen, et lavt effektpotentiale og som omdannes til andre stoffer i brugsfasen.
- *Tetrachlorethylen* (perchlorethylen) - ukendt energiforbrug i produktionsfasen, et højt effektpotentiale og med væsentlige udledninger i brugs- og bortskaffelsesfasen.
- *Ammoniak* - et mellemstort energiforbrug ved produktion, et lavt til mellemstort effektpotentiale og store udledninger i brugsfasen.

Vurderingen er gennemført som en LCA med få udvalgte effektkategorier og et simplificeret livsforløb. Den anvendte metode er nærmere beskrevet i afsnit 5.1. Et simplificeret livsforløb og opgørelsesdata for de betragtede kemikalier er præsenteret i afsnit 5.2. Den samlede vurdering af kemikaliers betydning i forskellige faser af livscyklus er præsenteret i afsnit 5.3.

### 5.1 Anvendt metode

Den simple LCA omfatter følgende faser: udvinding af råvarer, produktion af råmaterialer, produktion af færdigvarer, brug af produktet og bortskaffelse af det udtjente produkt. Transportprocesser er generelt udeladt af vurderingen, med mindre der er tale om transport i forbindelse med landbrugsprocesser som fx udbringning af gødning mv. Transport er i visse tilfælde inkluderet i de anvendte aggregerede data for produktion af råvarer fx polystyren. Den funktionelle enhed er for alle eksemplerne brug af 1 kg af det færdige produkt dvs. 1 kg polystyrenprodukt, 1 kg ethanol, 1 kg tetrachlorethylen og 1 kg ammoniak. Polystyren er det eneste "produkt" hvor råvaren (styren) forarbejdes i et eller flere mellemtrin inden anvendelsen.

Formålet med vurderingen er at sammenligne og vurdere betydningen af human og økotoksikologiske effekter ved produktion, brug og bortskaffelse af kemikalier i forhold til øvrige potentielle effekter. Det er derfor valgt at opgøre de potentielle effekter per kilo kemikalie. Informationerne om og beskrivelser af de forskellige processer er så vidt muligt hentet i åbne kilder, fx Ullmann, LCI databaser o.l.

Jiménez-González *et al.* (2000) har beskrevet en metode til systematisk bestemmelse af *gate-to-gate* data (energiforbrug, emissioner og affald) for produktion af kemikalier baseret på teknisk beskrivelse af produktionen af de pågældende kemikalier samt grundlæggende kendskab til kemiske enhedsprocesser. Den beskrevne metode omfatter følgende trin:

- valg af relevant proces,
- detaljeret beskrivelse af den valgte proces,
- opstilling af massebalance for den valgte proces og
- opstilling af energibalance for den valgte proces.

Et gennemført case-studie vedrørende produktion af ammoniak viser rimelig overensstemmelse med publicerede LCI data med undtagelse af emission af ammoniak og carbondioxid. Afvigelsen forklares blandt andet ved, at den beskrevne metode anvender en tommelfingerregel til estimering af luftformige emissioner<sup>1</sup> og derved medtager nogle emissioner, som normal ikke registreres. Carbondioxid regnes som et biprodukt, mens det i publicerede LCI data opgøres som luftemission.

I det omfang, der i de valgte eksempler ikke findes opgørelser over emissioner til luft, vil ovennævnte tommelfingerregel blive anvendt.

Vurderingen i denne simple LCA omfatter følgende potentielle effekter: drivhuseffekt, forsurening, eutrofiering, økotoksicitet, persistent toksicitet<sup>2</sup> og human toksicitet. Effekterne er udvalgt fra UMIP's bruttoliste, fordi det på forhånd blev vurderet, at der her ville vise sig en række forskelle mellem de undersøgte stoffer. En vurdering af samtlige effekter bidrager naturligvis med et mere nuanceret billede, men ville på samme tid forringe mulighederne for en overskuelig grafisk præsentation. Tabel 25 viser eksempler på hvilke emissioner, der bidrager til de enkelte effekter. De efterfølgende beregninger er gennemført med LCV-værktøjet (LCV) med anvendelse af den medfølgende database. Det betyder, at processerne fra databasen bidrager med en lang række emissioner, som ikke er vist i Tabel 25.

---

<sup>1</sup> For kemikalier med kogepunkt i intervallet 20-60°C antages 2% fugitivt tab, for kemikalier med kogepunkt i intervallet 60-120°C antages 1% fugitivt tab og for gasser antages 0,5% fugitivt tab.

<sup>2</sup> Persistent toksicitet er en samleparameter, der kombinerer kronisk akvatisk og terrestrisk toksicitet.

Tabel 25. Potentielle effekter medtaget i vurderingen og stoffer, der bidrager til de enkelte effekter

Potentiel effekt	Kemisk formel	Stof
Drivhuseffekt	CO <sub>2</sub>	Carbondioxid
	CH <sub>4</sub>	Methan
	N <sub>2</sub> O	Dinitrogenoxid
Forsuring	SO <sub>2</sub>	Svovldioxid
	NO <sub>x</sub>	Nitrogenoxider
	NH <sub>3</sub>	Ammoniak
Eutrofiering	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	Nitrat
	NO <sub>x</sub>	Nitrogenoxider
	NH <sub>3</sub>	Ammoniak
Humantoksikologiske effekter	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CHCH <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> )	Styren
	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	Ethanol
	C <sub>2</sub> Cl <sub>4</sub>	Tetrachlorethylen
	NH <sub>3</sub>	Ammoniak
Økotoksikologiske effekter	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CHCH <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> )	Styren
	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	Ethanol
	C <sub>2</sub> Cl <sub>4</sub>	Tetrachlorethylen
	NH <sub>3</sub>	Ammoniak

Effektpotentialer for de potentielle effekter er beregnet ved hjælp af effektfaktorer for de specifikke stoffer. Der er bred konsensus om effektfaktorerne for drivhuseffekt, forsurening og eutrofiering, idet de er baseret på anerkendte klimamodeller eller kemiske sammenhænge, mens der er større usikkerhed om effektfaktorerne for human- og økotoksikologiske effekter. Effektfaktorer for henholdsvis human toksicitet og økotoksicitet for styren, ethanol, tetrachlorethylen og ammoniak er vist Tabel 26 og Tabel 27.

Tabel 26. Effektfaktorer for human toksicitet.

Stof	CAS-nummer	Stof emitteret til	Effektfaktor <sup>1</sup>		
			EF(htl)	EF(htv)	EF(htj)
Ammoniak	7664-41-7	luft	3,6x10 <sup>1</sup>	0	0
		vand	0	0	0
		jord	0	0	0
Ethanol	64-17-5	luft	1,1x10 <sup>2</sup>	2,9x10 <sup>-7</sup>	1,5x10 <sup>-4</sup>
		vand	0	1,5x10 <sup>-6</sup>	0
		jord	0	0	1,8x10 <sup>-4</sup>
Styren	100-42-5	luft	1,0x10 <sup>3</sup>	0	0
		vand	1,0x10 <sup>3</sup>	0	0
		jord	1,0x10 <sup>3</sup>	0	0
Tetrachlorethylen	127-18-4	luft	2,9x10 <sup>4</sup>	0,36	4,0x10 <sup>-2</sup>
		vand	2,9x10 <sup>4</sup>	0,36	4,0x10 <sup>-2</sup>
		jord	2,9x10 <sup>4</sup>	0,36	4,0x10 <sup>-2</sup>

1. EF(htl): human toksicitet via luft; EF(htv); human toksicitet via vand og EF(htj) human toksicitet via jord.

Effektfaktorerne for eksponering via luft ses at være stigende for stofferne ammoniak, ethanol, styren og tetrachlorethylen i nævnte rækkefølge med ca. en faktor 10 til forskel mellem stofferne. Eksponering via vand og jord er kun relevant for ethanol og tetrachlorethylen. Styren og tetrachlorethylen fordeler sig i samme forhold mellem medier uanset til hvilket medie stoffet emitteres, hvilket resulterer i samme effektfaktorer for styren eller tetrachlorethylen uanset om de emitteres til luft, vand eller jord.

Tabel 27. Effektfaktorer for økotoksicitet.

Stof	CAS-nummer	Stof emitteret til	Effektfaktor <sup>1</sup>		
			EF(øtva)	EF(øtvk)	EF(øtjk)
Ammoniak	7664-41-7	luft		2	19
		vand	6	11	0
		jord		0	24
Ethanol	64-17-5	luft		0,001	0,01
		vand	0,002	0,005	0
		jord		0	0,01
Styren	100-42-5	luft		0	0
		vand	40	0	0
		jord		0	0
Tetrachlorethylen	127-18-4	luft		20	1,1
		vand	10	20	1,1
		jord		20	1,1

1. EF(øtva): akut akvatisk økotoksicitet; EF(øtvk): kronisk akvatisk økotoksicitet; EF(øtjk): kronisk terrestrisk økotoksicitet.

Akut økotoksiske effekter i det akvatiske miljø ses kun ved direkte udledning til vand, og styren har den højeste toksicitet efterfulgt af tetrachlorethylen og ammoniak. Kronisk økotoksiske effekter i det akvatiske miljø ses primært for stoffer udledt direkte til det akvatiske miljø. For tetrachlorethylen gælder som tidligere nævnt, at stoffet fordeler sig i samme forhold mellem luft, vand og jord, uanset om det udledes til det ene eller det andet medie, og det afspejles, som for human toksicitet, i ens effektfaktorer for kronisk akvatisk og terrestrisk økotoksicitet. Tetrachlorethylen har den højeste toksicitet efterfulgt af ammoniak og ethanol. Ammoniak udviser den højeste kronisk terrestriske toksicitet efterfulgt af tetrachlorethylen og ethanol

## 5.2 Simplificeret livsforløb for de betragtede kemikalier

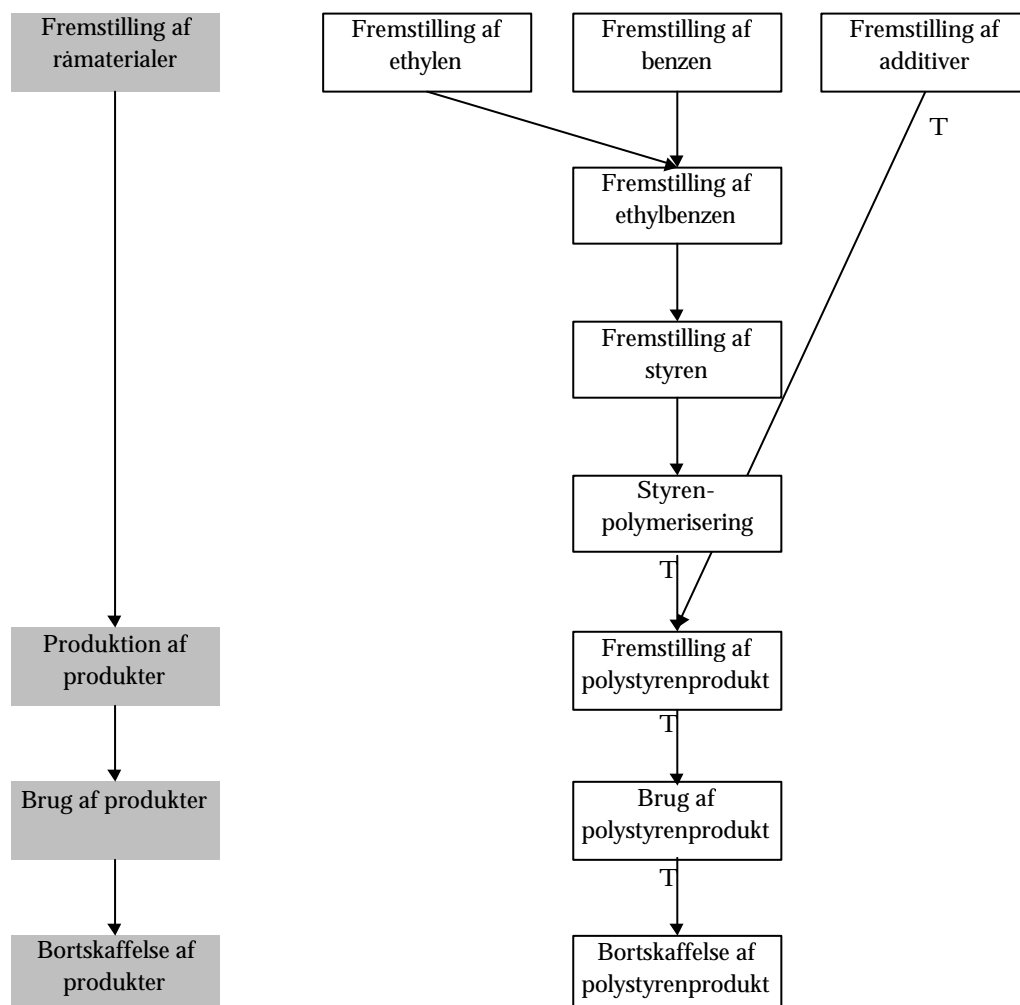
### 5.2.1 Styren (til polystyren)

Styren fremstilles ud fra naturgas og råolie. Naturgas og råolie indvindes i fx Nordsøen, hvorfra det transporteres via tankskib eller "pipe-line" til raffinaderier, hvor det raffineres og crackes. Ved disse processer dannes ethylen og benzen, som er udgangspunkt for produktion af ethylbenzen. Ethylbenzen omdannes til styren ved katalytisk dehydrogenering, hvorefter styren destilleres og overskydende hydrogen fjernes oxidativt; denne proces står for 85% af styrenproduktionen (James & Castor, 1994). Produktionen af styren foregår i kontinuerede processer i lukkede systemer, hvorfor emissionen af styren og mellemprodukter skønnes at være minimal.

Styren polymeriseres til polystyren og afhængig af de valgte procesbetingelser mv. fås "crystal polystyrene" / "general purpose polystyrene" (GPPS), "high impact polystyrene" (HIPS) eller "expandable polystyrene" (EPS) (Maul *et al.*, 1994). Afhængig af processens udformning vil polymeren kunne indeholde en vis mængde ikke reageret styrenmonomer. Polystyren forarbejdes til det færdige produkt ved fx sprøjtstøbning. Polymeriseringen af styren til polystyren foregår ofte i tilknytning til styrenproduktionen, hvorfor der ikke forekommer transport eller væsentlige udslip af styren.

Procestræ for fremstilling af polystyren, forarbejdning til produkt, brug og bortskaffelse af produktet er vist i Figur 7.

Figur 7. Procestræ for fremstilling, brug og bortskaffelse af polystyrenprodukt; udvinding af energiråvarer samt andre råmaterialer er ikke medtaget i procestræet.



Information om ressourceforbrug, emissioner og affald ved produktion af polystyren er baseret på Boustead (1999). Bortskaffelse af polystyrenproduktet sker ved forbrænding med energiudnyttelse, hvor den udvundne energi antages at erstatte varmeproduktion i et anlæg (1-100 MW) fyret med let fuelolie (effektivitet 72%). Oprindelse af data herunder argumentation for eventuelle estimater er givet i Tabel 28.

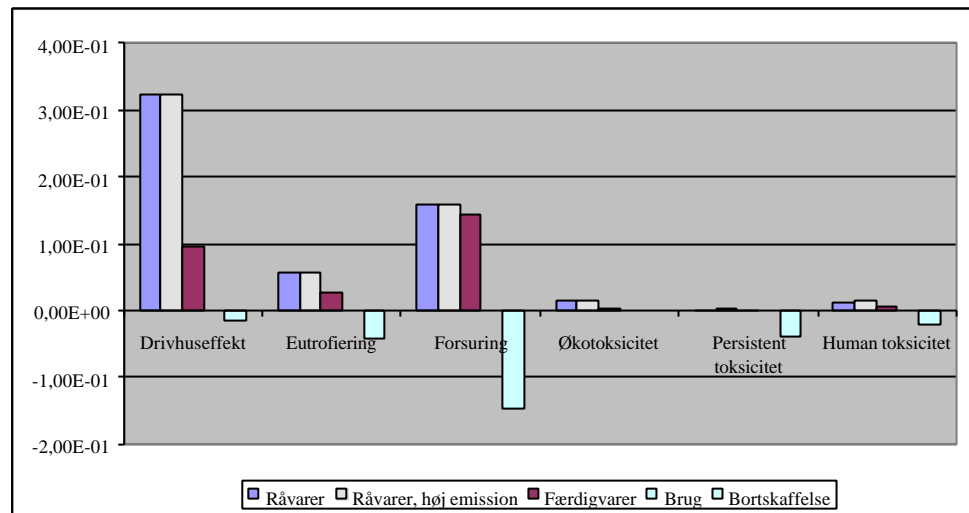
Tabel 28. Oprindelse af råvarer med angivelse af kilde til anvendte informationer.

Stof/proces	Kemisk formel	Oprindelse	Kilde
Fremstilling af styren og polymerisering til polystyren	$C_6H_5CHCH_2$	Europa	Boustead (1999)
Termoformning af polystyren		Danmark	Boustead (1999)
Forbrænding af polystyren med energigenvinding		Danmark	LCV
Varmeproduktion fortrængt		Danmark	Varme produceret i anlæg (1-100 MW) fyret med let fuelolie (LCV)



Resultater af den enkle LCA af et polystyrenprodukt er vist i Figur 8. Opgørelsen publiceret af APME angiver ikke emissionen af styren, hvorfor det er antaget, at den opgive emission af aromatiske hydrocarboner på 0,21 g/kg polystyren udgøres af styren. Jiménez-González *et al.* (2000) angiver som tommelfingeregul et fugitivt tab af gasser på 0,5% svarende til 5 g styren/kg polystyren, og effektpotentialer beregnet på grundlag af "høj" emission af styren er ligeledes vist i Figur 8 (angivet som "råvarer, høj emission").

Figur 8. Normaliserede effektpotentialer (mPE) for produktion, brug og bortskaffelse af 1 kg polystyren (EPS) produkt.



Figur 8 viser, at de energirelaterede emissioner er dominerende for produktion, brug og bortskaffelse af polystyren. Produktion af råvarer giver tre gange så stort bidrag til potentiel drivhuseffekt i forhold til produktion af færdigvarer. Forskellen er mindre udtalt for eutrofiering og forsuring. Bidragene til økotoksicitet, persistent toksicitet og human toksicitet er forsvindende små i forhold til de øvrige effektpotentialer med undtagelse af bortskaffelsesfasen, hvor den fortrængte energiproduktion giver anledning til "fortrængt" persistent toksicitet såvel som human toksicitet.

De kasserede polystyrenprodukter forbrændes med energiudnyttelse og erstatter varme produceret på fuelolie baseret anlæg. Der forekommer kun ringe reduktion i drivhuseffekten, da den forbrændte mængde plast modsvares af stort set samme mængde fuelolie (og derved samme CO<sub>2</sub>-bidrag). Der ses højere reduktion i eutrofiering og forsuring, idet platen fortrænger fuelolie med højere indhold af svovl i en proces, der giver anledning til højere produktion af NO<sub>x</sub> per produceret energienhed.

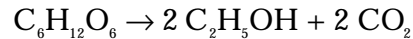
Emissionen af styren fremgår som tidligere nævnt ikke af den anvendte opgørelse (Boustead, 1999), hvorfor den er skønnet til 0,2 henholdsvis 5 g styren/kg polystyren. Af Figur 8 fremgår det, at 25 x forøgelse af emissionsfaktoren for styren kun giver en forsvindende ændring af såvel økotoksicitet som human toksicitet.

Kemikalier fremstillet i lukkede systemer giver sandsynligvis ikke anledning til væsentlige emissioner i produktionsfasen, og ved polymerisering er teknikken udviklet med henblik på at minimere indholdet af restmonomer i platen, hvorfor emissionen af monomer i brugsfasen er forsvindende. Styrenemission

vil således kun give anledning til væsentlige effektpotentialer, hvis emissionen er underestimeret, eller hvis effektpotentialerne er underestimerede.

### 5.2.2 Ethanol

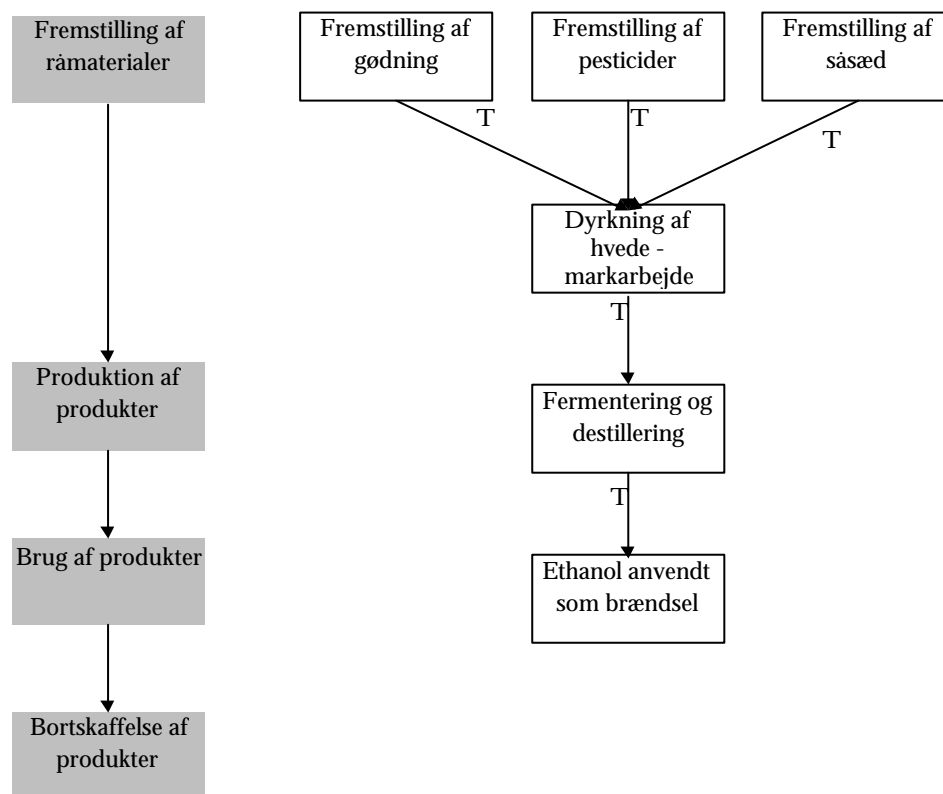
Ethanol fremstilles ved kemisk syntese - direkte eller indirekte hydrering af ethylen, ud fra methanol - eller ved fermentering af sukker eller sukkerholdige afgrøder (Kosaric *et al.*, 1994). På verdensplan produceres omkring 63% ethanol ved fermentering. Fermenteringen foregår ved hjælp af særligt udviklede gærtyper, som giver et højt udbytte af ethanol og lavt udbytte af biprodukter samt er tolerant over for høj alkoholprocent mv. Reaktionsligningen for produktion af ethanol er:



Fermenteringen kan ske batchvis eller i en kontinuert proces i vandigt medium. Fermenteringen resulterer i ca. 10% ethanol i vand, og den efterfølges af destillering af ethanolen til en renhedsgrad på 88% til 99,9% afhængig af, hvad det skal bruges til. Alternativer til destillering er fx solvent ekstraktion og forskellige membranteknologier. Ethanol anvendes i alkoholiske drikke, som opløsningsmiddel, som råmateriale i kemisk syntese og som brændsel.

Den valgte case er baseret på dyrkning af hvede (herunder mekanisk arbejde, produktion og udbringning af gødning, produktion og udbringning af pesticider, høst) samt fermentering af kulhydraterne og destillering af ethanol (Richards, 2000). Procestræ for fremstilling af biomasse, ethanol og anvendelse af ethanol samt strå som brændsel er vist i Figur 9. Alternativet til anvendelse af strå som brændsel er nedpløjning, hvorved biomasse og næringsstoffer tilbageføres til jorden. Ved anvendelse af dette alternativ er energibalancen knap så favorabel.

Figur 9. Procestræ for fremstilling af biomasse, ethanol og anvendelse af ethanol samt strå som brændsel.



Oprindelsen af data herunder argumentation for eventuelle estimater er givet i Tabel 29. Oprindelse af råvarer mv. med angivelse af kilde til de anvendte informationer..

Tabel 29. Oprindelse af råvarer mv. med angivelse af kilde til de anvendte informationer.

Stof/proces	Kemisk formel	Oprindelse	Kilde
Produktion af gødning		Europa	Richards 2000
Produktion af pesticider		Europa	Richards 2000
Produktion af såsæd		Danmark	Richards 2000
Markarbejde		Danmark	Richards 2000
Fermentering og destillering	$C_2H_5OH$	Danmark	Richards 2000 Emissioner af ethanol er estimeret til 2% (Jiménez-González <i>et al.</i> , 2000)
Transportprocesser		Danmark	LCV
Forbrænding af ethanol		Danmark	Estimeret med udgangspunkt i LCV - samt 0,1% ethanol; ethanol regnes $CO_2$ -neutralt
Forbrænding af strå		Danmark	Fenhann og Kilde 1994; strå regnes $CO_2$ -neutralt

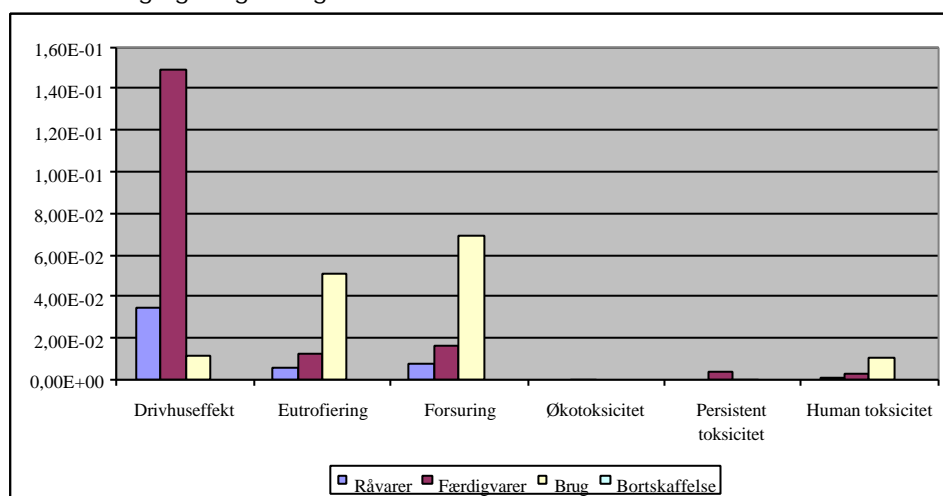
Energibalancen for fremstilling af biobrændsel er præsenteret i Tabel 30.

Tabel 30. Energibalancel ved fremstilling af biobrændsel.

Proces/ energikilde	Energiform	MJ/ha	MJ/ton
Kerner	ethanol	74189	30036
Strå	biomasse	97500	39474
Udbytte		171689	69510
Markarbejde	diesel	4773	1932
Gødning	naturgas	8070	3267
Pesticider mv.	naturgas	1045	423
Frø	naturgas	925	374
Emballage	mix	485	196
Transport	diesel	2149	870
Forarbejdning	naturgas	50810	20571
Energiforbrug		68257	27634
Overskud		103432	41875

Resultaterne af den enkle LCA af produktion af biomasse, fermentering og brug af ethanol er vist i Figur 10. Jiménez-González *et al.* (2000) angiver som tommelfingeregul et fugitivt tab på 1-2% for flydende stoffer svarende til 20 g ethanol/kg ethanol fremstillet ved destillering; idet ethanol har et kogepunkt på 78°C burde der retteligt være anvendt et skønsmæssigt tab på 1%, men som worst case antages et tab på 2% under destilleringen. Som angivet i Tabel 29 er der antaget en forbrændingseffektivitet på 99,9% svarende til et tab på 0,1% ethanol eller 1 g ethanol per kg forbrændt ethanol.

Figur 10. Normaliserede effektpotentialer (mPE) for produktion af biomasse, fermentering og brug af 1 kg ethanol.



Figur 10 viser, at det største bidrag til potentiel drivhuseffekt forekommer i produktionsfasen, idet der forekommer et væsentligt energiforbrug til fermentering samt destillering af ethanol. Selve forbrændingen af ethanol og strå giver ikke væsentligt bidrag til potentiel drivhuseffekt, idet biobrændsel betragtes som CO<sub>2</sub>-neutralt; den potentielle drivhuseffekt, der alligevel forekommer, kan tilskrives emission af metan og dinitrogenoxid.

Den potentielle eutrofiering og forsuring er mest markant i brugsfasen, idet forbrænding af biobrændsel giver anledning til emission af NO<sub>x</sub>, som er en procesafhængig emission.

Effektpotentialerne for persistent toksicitet og human toksicitet er uden betydning i forhold til de øvrige effektpotentialer, om end der ses et bidrag til

human toksicitet i brugsfasen, som sandsynligvis tilskrives emissionen af dinitrogenoxid ved forbrænding af biomasse (halm). Bidraget fra emission af ethanol er stort set uden betydning, og vil kun få konsekvenser for den samlede vurdering, hvis emissionen af ethanol eller effektfaktorerne for ethanol er underestimerede.

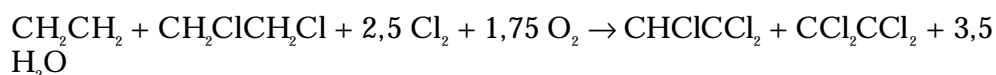
Fotokemisk ozondannelse er ikke medtaget i vurderingen ligesom den potentielle emission af partikler ikke er medtaget i vurderingen.

### 5.2.3 Tetrachlorethylen

Tetrachlorethylen fremstilles ud fra hydrocarboner eller chlorerede hydrocarboner ved én af følgende tre processer (Rossberg *et al.*, 1994):

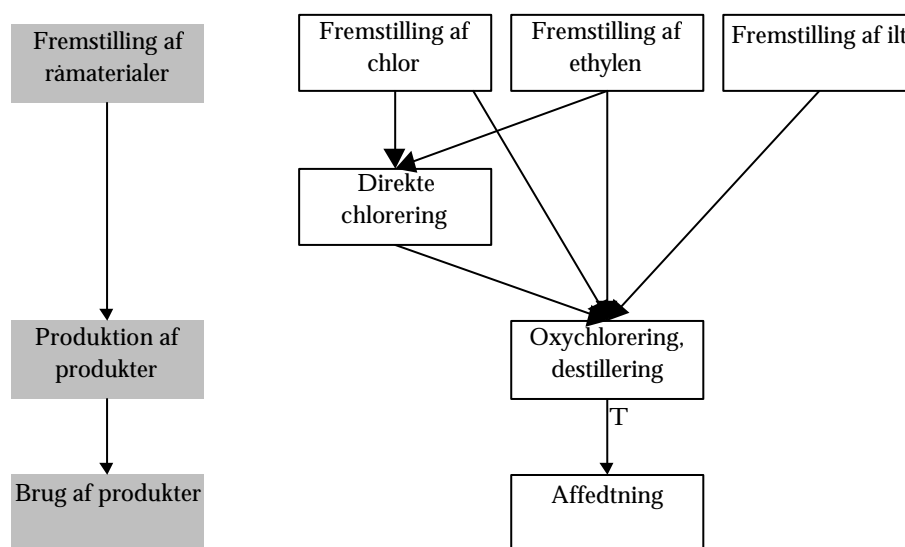
1. chlorering af acetylen - via trichloroethylen
2. oxychlorinering af ethylen eller 1,2-dichlorethan
3. højtemperatur chlorinering ud fra C<sub>1</sub>-C<sub>3</sub> hydrocarboner eller chlorerede hydrocarboner

De to sidstnævnte processer angives at være de mest anvendte. Dette eksempel tager udgangspunkt i oxychlorinering, som resulterer i en blanding af tetrachlorethylen og trichlorethylen (TRI/PER processen). Reaktionsligningen for processen er følgende:



Processerne er illustreret i Figur 11.

Figur 11. Procestræ for fremstilling og brug af tetrachlorethylen.



Oprindelsen af data, herunder argumentation for eventuelle estimater, er givet i Tabel 31.

Tabel 31. Oprindelse af råvarer mv. med angivelse af kilde til de anvendte informationer.

Stof/proces	Kemisk formel	Oprindelse	Kilde
Ilt	O <sub>2</sub>	Belgien	Energiforbrug estimeret til 22 kWh (80 MJ)
Ethylen	CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub>	Belgien	Boustead (1999)
Chlor	Cl <sub>2</sub>	Belgien	Boustead (1998)
Direkte chlorering		Belgien <sup>1</sup>	Proces forløber uden input af energi Emissioner estimeret - 0,3% fordelt på chlor, ethylen og 1,2-dichlorethan (se Tabel 32)
Oxychlorering - destillering		Belgien <sup>1</sup>	Energiforbrug estimeret til 22 kWh (80 MJ). Emissioner estimeret - 2% fordelt ligeligt på chlor, ethylen, 1,2-dichlorethan, trichlorethylen og tetrachlorethylen (se Tabel 32)
Brug af tetrachlorethylen til affedtning		Danmark	Op mod 100% emitteres til luft (Maag, 1998); i denne case er det skønnet at 50% emitteres og 50% bortskaffes som farligt affald.

<sup>1</sup> Tetrachlorethylen produceres blandt andet af Solvay, Belgien.

Emissionsfaktorer - opgivet som interval - for en række processer involveret i produktionen af tetrachlorethylen (Carpenter *et al.*, 1990) er præsenteret i Tabel 32.

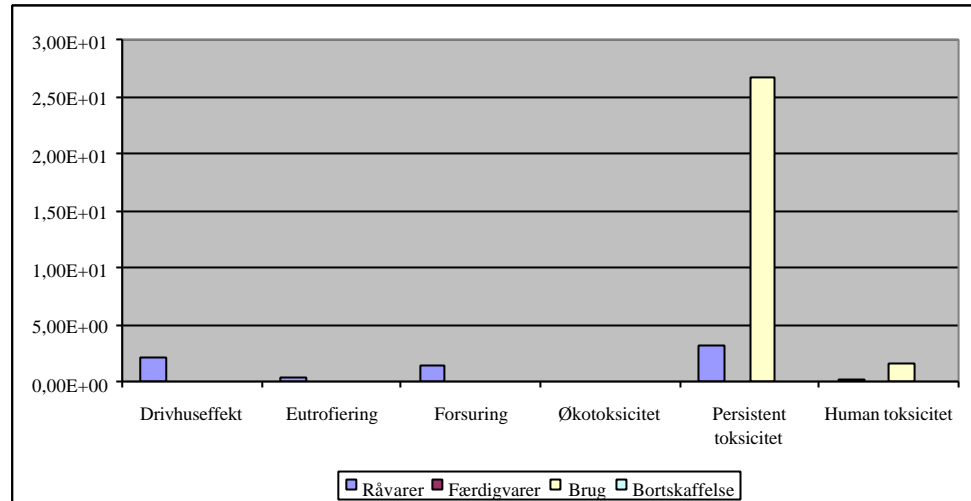
Tabel 32. Emissionsfaktorer for processer i tetrachlorethylen-produktion (Carpenter *et al.*, 1990).

Enhedsproces	Delmiljø	Tilstandsform	Emission kg/ton	Stoffer <sup>1</sup>
Halogenering	luft	gas	0,001-2,8	ethan methan antimontrichlorid tetrachlorethan trichlorethan trichlorethylen tetrachlorethylen dichlorethan
	vand	flydende, fast	spor-344	chlorerede opløsningsmidler (spor) calcium calciumchlorid
	jord	flydende, fast	10-200	hexachlorbutadien chloroethaner chlorbutadiener tjære "residues"
Oxohalogenering	luft	gas	0,012-21,3	vinylchlorid vinylidinchlorid tetrachlorethylen trichlorethylen dichlorethylen

<sup>1</sup> Sammensætningen er ikke oplyst.

Resultaterne af den simple LCA af produktion og brug af tetrachlorethylen er vist i Figur 12.

Figur 12. Normaliserede effektpotentialer (mPE) for produktion og brug af 1 kg tetrachlorethylen.



Figur 12 viser, at persistent toksicitet er absolut dominerende, hvilket skyldes, at det er antaget, at 50% af det centrale stof emitteres til luft under brugen, mens den resterende del bortskaffes som farligt affald. Såvel persistent toksicitet som human toksicitet er beregnet ud fra den samme emission af tetrachlorethylen. Emission af en given mængde tetrachlorethylen giver således anledning til relativt større effekt i det akvatiske miljø end hos mennesker. Forskellen i udslaget af de to effektkategorier kan forklares ved forholdet mellem effektfaktorer for tetrachlorethylen og de relevante normaliseringsreferencer.

Der har generelt været få specifikke oplysninger om produktion af tetrachlorethylen med undtagelse af råvarerne chlor og ethylen, hvorfor der er anvendt worst case skøn for energiforbrug ved fremstilling af ilt og tetrachlorethylen.

#### 5.2.4 Ammoniak

Ammoniak (NH<sub>3</sub>) fremstilles ved reaktion af nitrogen med hydrogen under tilførelse af energi. Processen kan i korte træk beskrives ved følgende (Bakemeier *et al.*, 1994):

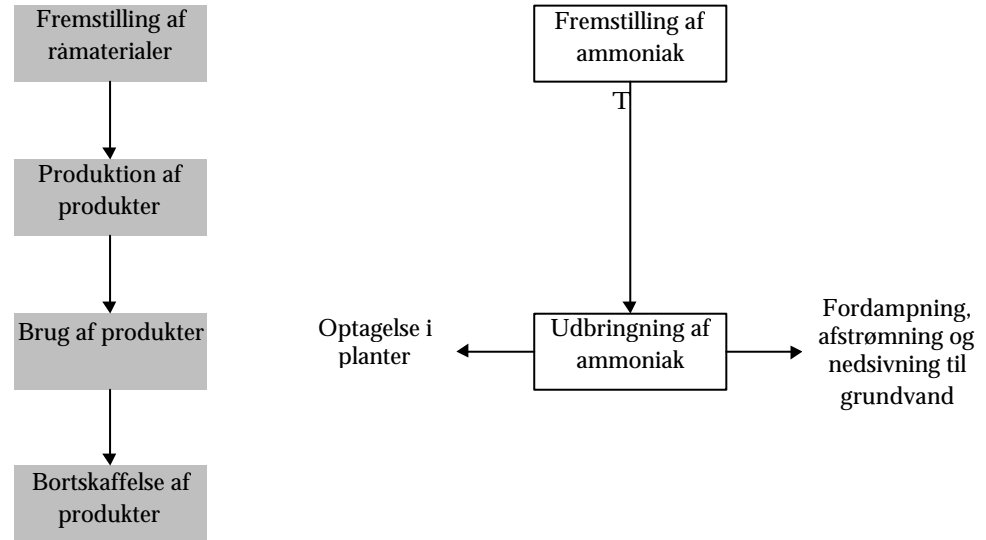
1. Fremstilling af syntesegas - med udgangspunkt i naurgas (methan) fremstilles hydrogen med carbondioxid som biprodukt
2. Separation af hydrogen og carbondioxid
3. Ammoniaksyntese -  $3\text{H}_2 + \text{N}_2 \rightarrow 2\text{NH}_3$

Information om ressourceforbrug, emissioner og affald ved fremstilling af ammoniak er baseret på Boustead (1999) suppleret med et estimat af emission af NH<sub>3</sub> under produktionen udarbejdet af Jiménez-González *et al.* (2000).

Ammoniak bruges direkte som gødning eller som udgangspunkt for produktion af bl.a. urinstof og ammoniumphosphat. Ammoniakken transporteres med tankskib/lastbil eller tog/lastbil til brugere i Danmark, hvor den udbringes på/nedfældes i landbrugsjord. 99% optages og udnyttes i planter eller bindes i jorden (tabel 5.12; Andersen *et al.*, 1999). Skæbnen af den del af ammoniakken der ikke bliver optaget i planter eller bundet i jorden kendes ikke, men det skønnes at 0,5%, 0,25% og 0,25% henholdsvis fordamper, afstrømmer til overfladevand og nedsiver til grundvand (Andersen

*et al.*, 1999). Denne rate forekommer underestimeret, idet Brentrup *et al.* (2000) på grundlag af informationer om maksimalt potentielt tab som funktion af temperatur og infiltrering i jorden samt en tidsfaktor har beregnet det potentielle tab af ammoniak fra husdyrgødning til ca. 20% af den tilførte mængde.

Figur 13. Procestræ for fremstilling og brug af ammoniak.



Bortskaffelsesfasen er ikke relevant for ammoniak anvendt som gødning, idet ammoniakken optages - indbygges - i planterne i brugsfasen, og den del der ikke optages i planterne ender i det ydre miljø. Oprindelsen af data herunder argumentation for eventuelle estimater er givet i Tabel 33.

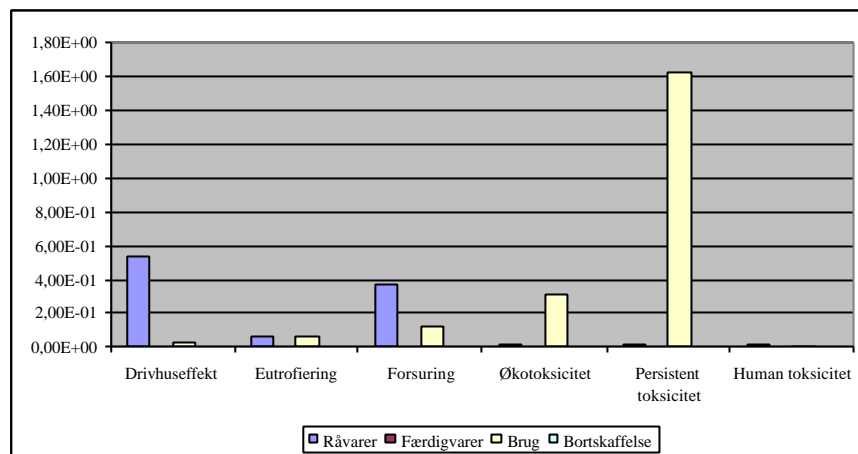
Tabel 33. Oprindelse af data mv. med angivelse af kilde til de anvendte informationer.

Stof/proces	Kemisk formel	Oprindelse	Kilde
Ammoniak	NH <sub>3</sub>	Europa	Boustead
Udbringning af ammoniak		Danmark	200 kg N/ha; udbringning af tre omgange: 6,6 l diesel/ha (Richards <i>et al.</i> , 2000). Emissionsfaktorer for traktor beregnet på grundlag af Mortensen <i>et al.</i> (1997).
Spredning i miljøet		Danmark	Der tabes 1% af den tilførte mængde (Andersen <i>et al.</i> , 1999); skønnet fordeling: 0,5% til luft; 0,25% til overfladevand henholdsvis grundvand.

Resultaterne af den simple LCA af produktion og udbringning af ammoniak er vist i Figur 14.



Figur 14. Normaliserede effektpotentialer (mPE) for produktion og brug af 1 kg ammoniak.



Figur 14 viser, at energirelaterede emissioner, som drivhuseffekt og forsuring, er dominerende for produktion af rå-/færdigvare, mens økotoksiske effekter, som persistent toksicitet og økotoksicitet, er dominerende for brugsfasen. Effekterne i brugsfasen kan primært tilskrives, at ammoniak under brugen spredes på landbrugsjord som gødning. Idet ammoniak har et højt damptryk og høj vandopløselighed vil en del fordampe eller blive udvasket, inden det optages af planter eller på anden måde immobiliseres i jorden. I det viste eksempel er der regnet med et tab på 1%, men resultatet i form af persistent toksicitet og økotoksicitet afhænger meget af tabet af ammoniak, hvorfor det er følsomt over for hvorvidt tabet er estimeret korrekt. En anden vigtig faktor er naturligvis den anvendte effektfaktor for de pågældende påvirkningskategorier. Dette blev kort berørt under den afsluttende workshop (se kapitel 7).

### 5.3 Samlet vurdering

De foregående afsnit præsenterer simple LCAer af produktion, brug og bortskaffelse af fire kemikaliebaserede produkter. Inden for projektets rammer er det valgt at benytte let tilgængelige data for de fire eksempler, idet formålet primært er at vise betydningen af emissioner af kemikalier i de forskellige faser af livscyklus. I flere tilfælde indeholder standardopgørelser (generiske data) for livscyklus af råvarer/produkter ikke detaljerede oplysninger om emissioner af specifikke stoffer, hvorfor de er estimeret med udgangspunkt i tommelfingerregler eller oplysninger fra andre kilder. De simple LCAer medtager følgende effektkategorier for de fire LCAer: drivhuseffekt, forsuring, eutrofiering, økotoksicitet, persistent toksicitet og human toksicitet.

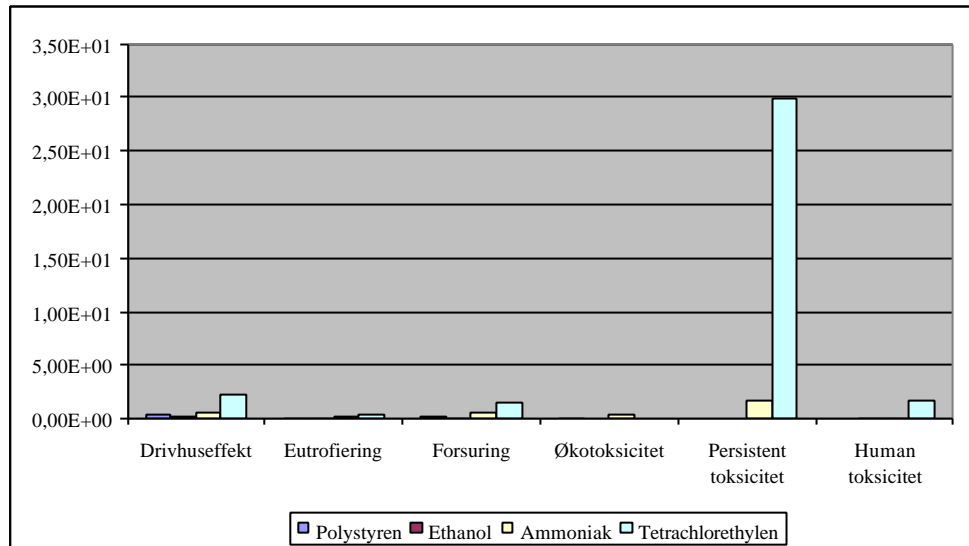
Produkterne er baseret på styren, ethanol, tetrachlorethylen og ammoniak, og de er udvalgt med følgende begrundelse:

- *Styren til polystyren* - relativt højt energiforbrug i produktionsfasen, et mellemstort effektpotentiale og minimale udledninger i brugs- og bortskaffelsesfasen.
- *Ethanol* - relativt lavt energiforbrug i produktionsfasen, et lavt effektpotentiale og som omdannes til andre stoffer i brugsfasen.

- *Tetrachlorethylen* (perchlorethylen) - ukendt energiforbrug i produktionsfasen, et højt effektspotentiale og med væsentlige udledninger i brugs- og bortskaffelsesfasen.
- *Ammoniak* - et mellemstort energiforbrug ved produktion, et lavt til mellemstort effektspotentiale og store udledninger i brugsfasen.

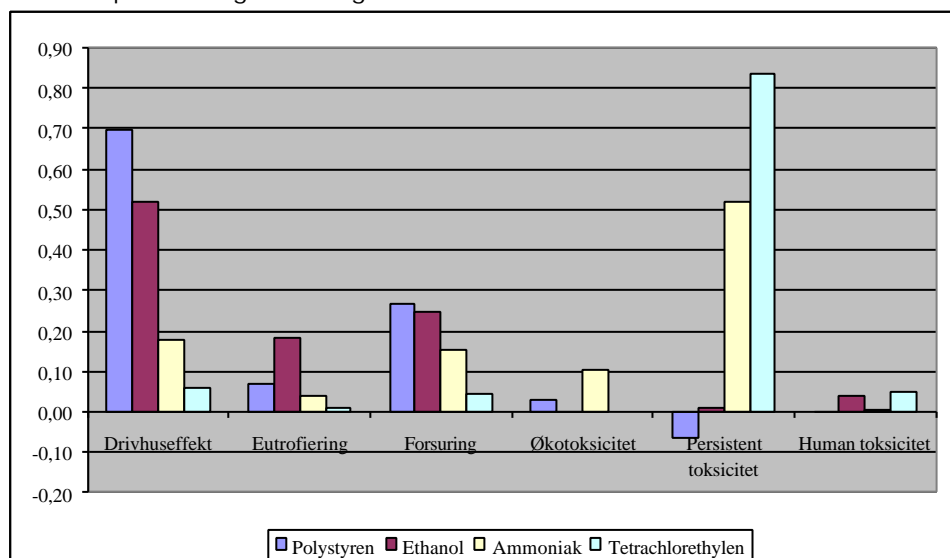
I Figur 15 er resultaterne af de fire LCAer sammenstillet, vel vidende at de fire eksempler ikke er relateret til samme funktionelle enhed og derfor i princippet ikke sammenlignelige.

Figur 15. Sammenstilling af resultater fra de fire eksempler. Effektpotentialerne er angivet i mPE.



Figur 15 viser, at eksemplet med produktion og brug af tetrachlorethylen har det markant største effektspotentiale (persistent toksicitet), men figuren giver ikke mulighed for at sammenligne fordelingen mellem de forskellige effektspotentiale. I Figur 16 er effektpotentialernes relative bidrag til de enkelte eksemplers samlede effektspotentiale vist.

Figur 16. Sammenstilling af relative bidrag til de forskellige effekt kategorier fra de fire eksempler. Bidragene er angivet i %.



Figur 16 viser, at energirelaterede emissioner er mest relevant for produktion, brug og bortskaffelse af polystyren. Det gælder til dels også for ethanol, på trods af at forbrænding af biobrændsel betragtes som CO<sub>2</sub>-neutralt. For såvel ammoniak som tetrachlorethylen gælder det, at stofferne under/efter brugen emitteres direkte til det ydre miljø, og persistent toksicitet ses at være det mest markante effektpotentiale. For ammoniak er både estimeringen af den udledte mængde og effektfaktoren af stor betydning for resultatet.

De fire eksempler viser, at det er vigtigt at kende såvel specifikke emissioner som deres størrelse. Ved anvendelse af generiske data (standardopgørelser) som fx APME opgørelser fås oplysninger om tungmetaller og specifikke organiske stoffer kun som "metaller" henholdsvis "hydrocarboner"/"aromatiske hydrocarboner". Opgørelserne giver ikke mulighed for at dele disse emissioner op på enkeltstoffer. Årsagen til de manglende oplysninger kan dels skyldes, at der ikke lokalt er fokus på de pågældende stoffer, hvorfor der ikke er krav til registrering, dels at de energirelaterede emissioner kendes og derfor meddeles, når der indsamles oplysninger til standardopgørelserne. Emissioner som fx styren vil ofte forekomme fra diffuse kilder, hvilket er med til at besværliggøre registreringen af dem. Det betyder, at vigtige bidrag til især human- såvel som økotoksikologiske effekter kan blive overset, jf. produktion af tetrachlorethylen. Der er således behov for en yderligere kvantificering og specificering af emissioner i produktionsfasen, hvis der skal gives et præcist billede af et kemisk stofs miljøbelastning over hele livsforløbet.

Det første eksempel viser, at kemikalier, der anvendes i en lukket matrix/polymeriseres til en mindre toksisk forbindelse, fx styren til polystyren med ubetydeligt indhold af restmonomer, ikke bidrager væsentligt til human- eller økotoksikologiske effekter i brugsfasen. Denne konklusion vil dog ikke gælde for monomerer/polymerer, hvor monomeren har potentielle sundhedsmæssige effekter ved kontakt som fx acrylmonomerer.

Det andet eksempel omhandler brug af biobrændsel (her illustreret ved ethanol), og hverken produktionsprocessen eller forbrændingsprocessen er særlig godt belyst på opgørelsesniveau. Der kan således være oversete bidrag til effektkategorierne fotokemisk ozondannelse, human- og økotoksicitet.

Det tredje eksempel omhandler et relativt toksisk stof - såvel human som økotoksikologisk - som i stort omfang emitteres under brugen (tetrachlorethylen). Det slår tydeligt igennem på de normaliserede effektpotentiale (persistent og human toksicitet). For dette eksempel gælder ligeledes, at produktionsprocessen ikke er særligt godt belyst, hvorfor der kan være oversete emissionsbidrag.

Det fjerde eksempel omhandler et stof - ammoniak anvendt som gødning - der spredes i miljøet i brugsfasen. For at kunne opgøre den samlede miljøbelastning er det vigtigt at have et præcist kendskab til ammoniaks spredning og skæbne i miljøet. I praksis gælder det om, at størst mulig mængde kvælstof kommer afgrøderne til nytte, hvorfor der af økonomiske årsager arbejdes med optimering af udbringningen med henblik på at reducere tabet til luft, overfladevand og grundvand. Et standardscenarie kunne suppleres med en følsomhedsvurdering, hvor det samlede tab såvel som fordelingen mellem luft, overfladevand og grundvand varieres.

# 6 Andre holistisk orienterede værktøjer

LCA er ikke det eneste værktøj, der forsøger at give en bred beskrivelse og vurdering af miljø-relaterede problemstillinger. Dels findes der afarter af LCA, hvilket i praksis vil sige værktøjer, der ikke lever op til kravene i ISO 14040-serien, dels findes der værktøjer, der tager udgangspunkt i andre typer af problemstillinger såsom økonomi, og endelig findes der værktøjer, der ikke fokuserer på produkter eller produktsystemer, men snarere på stoffer og materialer.

Med udgangspunkt i den foreløbige rapportering fra CHAINET findes der i dette kapitel en overordnet gennemgang af de muligheder for symbiose mellem forskellige værktøjer, som der umiddelbart kan peges på.

## 6.1 CHAINET

CHAINET var en *Concerted Action* under EU's miljø- og klimaprogram med det formål at oprette et netværk, hvor aktører på tre områder (automobiler, forbrugerelektronik og hvidevarer) blev kædet sammen med specialister indenfor forskellige værktøjer til miljøvurdering. Gennem at kæde virksomheder, institutioner og myndigheder med behov for både konkrete og strategiske vurderinger sammen med mange forskellige miljøspecialister var det muligt at analysere, om beslutningsstøtten kunne forbedres, hvis der blev anvendt en bredere vifte af værktøjer til vurderingen. Specielt var opmærksomheden rettet mod værktøjer, der kan bruges til at formidle viden gennem en leverandørkæde og til slutbrugerne.

I CHAINET, der forløb fra december 1997 til foråret 2000, deltog i alt ca. 100 personer fra omtrent lige så mange institutioner. Der blev afholdt et stiftende møde i England i maj 1998, og dette blev fulgt op af tre workshops i Nordwijkerhout (NL) i oktober 1998, Sevilla (E) i marts 1999 og i Dresden (D) i oktober 1999.

Rapporterne fra CHAINET foreligger i efteråret 2000 kun som udkast (Wrisberg *et al.* (2000)). Blandt det vigtigste indhold i rapporterne er en oversigt over forskellige værktøjers karakteristika, et kapitel med eksempler på, hvordan forskellige værktøjer har været kombineret i analyse af forskellige problemstillinger, samt tre udførligt beskrevne cases.

De værktøjer, der i rapportudkastet beskrives på forskelligt detaljeringsniveau, er:

- LCA (Life Cycle Assessment), der ikke beskrives nærmere i denne rapport.
- MIPS (Material Intensity Per Unit of Service), hvor miljøbelastningen opgøres som den mængde materiale, der flyttes af mennesker for at opfylde en given ydelse. Som eksempler på materialer, der flyttes, kan

nævnes jord, der skal flyttes for at bygge en vej og jord med et indhold af mineraler.

- ERA (Environmental Risk Assessment), der foregår i tre trin: Det første trin er en fareidentifikation, hvor sammenhængen mellem forskellige eksponeringsniveauer og forekomsten/alvorligheden af de potentielle effekter analyseres. Det andet trin er en effektvurdering, der koncentrerer sig om at bestemme PNEL/PNEC (*Predicted No Effect Level / Concentration*). Det sidste trin er en bestemmelse af PEC eller TDI (*Predicted Environmental Concentration* eller *Total Daily Intake*). Resultaterne fra de tre trin kan bruges til at vurdere forholdet PEC/PNEC, d.v.s forholdet mellem hvor meget, mennesker og miljø kan blive udsat for, og den koncentration, hvor der ikke forventes at være en effekt. Et højt forhold er således udtryk for en stor risiko.
- MFA (Material Flow Accounting) og SFA (Substance Flow Accounting), hvor det opgøres hvor store mængder af et materiale/kemisk forbindelse, der passerer ind og ud af et system (f.eks. et land, en region, en industriel sektor, en virksomhed, en husholdning) og hvilke veje, det sker.
- CERA (Cumulative Energy Requirements Analysis), der opgør det samlede behov for primær energi i forbindelse med produktion, brug og bortskaffelse af et økonomisk gode (et produkt eller en serviceydelse).
- IOA (Environmental Input-Output Analysis)
- Analytical tools for ecodesign, der deles op i tre kategorier:
  - Kvantitative LCA-lignende værktøjer,
  - Matricer, hvor den ene akse typisk er opdelt i livscyklusfaser og den anden akse f.eks. omhandler indgreb i miljøet, udvindingsprocesser og emissioner.
  - Checklister, der f.eks. kan bestå af en række spørgsmål eller punkter, man skal være specielt opmærksom på.
- LCC (Life Cycle Costing), hvor omkostningerne ved et produkt beregnes over hele livsforløbet, inklusive både interne og eksterne (samfundsmæssige) omkostninger.
- TCA (Total Cost Accounting), der giver en langsigtet og omfattende analyse af de fulde interne omkostninger og besparelser ved miljøtiltag i form af f.eks. renere teknologi projekter.
- CBA (Cost Benefit Analysis), hvor det bestemmes, om fordelene ved en investering eller en politik opvejer de omkostninger, der er forbundet med initiativet.

Den korte beskrivelse giver ikke mulighed for en nærmere sammenligning af værktøjerne. Det er dog klart, at mange af værktøjerne har et overlap i form af fælles oplysninger – eller at de behandler den samme problemstilling med forskellige metoder.

I CHAINET-rapporterne er værktøjerne delt op i tre kategorier, afhængig af system definitionerne:

Tabel 34 . Kategorier af værktøjer i CHAINET-rapporten.

Types of system definition	Tools with purely physical information	Tools with physical and monetary definition
Demand/function driven	LCA, MIPS, CERA, analytical tools for ecodesign, MFA with hidden flows	LCC, TCA, CBA
Boundary driven	ERA, MFA, Environmental IOA	
Agreement driven	No analytical tools available	

I rapporterne beskrives der tre modeller for at kombinere værktøjer:

- Som helt eller delvis overlappende værktøjer. Som eksempel på helt overlappende værktøjer kan nævnes LCA og MIPS, der begge giver en vurdering af den samlede miljøbelastning over livsforløbet, om end med vidt forskellige metoder. Der er således ikke grund til at anvende begge værktøjer på den samme problemstilling. Som eksempel på delvist overlap kan nævnes, at SFA (Substance Flow Analysis) kan indeholde en generisk risikovurdering (ERA) – og omvendt.
- Trinvis brug af værktøjer, hvor der for eksempel startes med at gennemføre en screening LCA, hvorefter der gennemføres en fuld LCA med en forholdsvis avanceret Impact Assessment eller der foretages en risikovurdering af udvalgte situationer. Et andet eksempel er at en MFA (Material Flow Analysis) kan efterfølges af en række SFA (Substance Flow Analysis) for at præcisere den første viden.
- Parallel brug af værktøjer, hvor informationer fra to eller flere enkeltværktøjer kombineres for at give et mere nuanceret billede af en problemstilling. En kombination af LCA og LCC (Life Cycle Costing) giver således et samtidigt billede af de miljømæssige og de økonomiske konsekvenser af et initiativ.

Rapportens beskrivelser af værktøjer og eksempler er ikke særligt detaljeret omkring datakrav. Det er oplagt, at en del grundlæggende oplysninger nødvendigvis må være fælles for mange af værktøjerne, men en præcis analyse af mulighederne for at udveksle informationer fra et værktøj til et andet kræver et væsentligt mere detaljeret overblik. De følgende vurderinger og anbefalinger er derfor først og fremmest en subjektiv vurdering, der er baseret på deltagelse i CHAINET's workshops og alment kendskab til værktøjerne.

Den mest oplagte mulighed for udveksling af kemikalierrelevante oplysninger findes i værktøjer til risikovurdering. Årsagen til dette er, at risikovurdering af kemiske enkeltstoffer, kemiske processer og hele kemiske anlæg indebærer en grundig procedure, der er opbygget gennem mange års diskussioner mellem myndigheder, industri og miljø- og sundhedseksperter. En væsentlig konsekvens af dette er, at der generelt vil blive anvendt de bedst tilgængelige data og at vurderingsmetoderne i vid udstrækning er accepterede af alle parter. Risikovurdering har da også været en væsentlig inspirationskilde ved udarbejdelse af metoder til miljø- og sundhedsvurderinger i LCA.

De data, der kan udveksles, omhandler både effekt- og eksponeringspotentialer. Som regel vil risikovurderingens data om effektpotentialer være af mindst den samme kvalitet og det samme detaljeringniveau, som i en LCA. Risikovurderingens data om eksponeringspotentialer har ofte et lidt andet format end det, der bruges i LCA. Årsagen til dette er, at risikovurderingen omhandler en konkret situation, hvor der er kendskab til f.eks. produktionsmængder, procesparametre og recipienters følsomhed. Det er imidlertid de samme oplysninger vedrørende boinedbrydelighed og bioakkumulerbarhed, der anvendes i både LCA og ERA, så en direkte overførsel af data er ofte en oplagt mulighed. Hvis der anvendes nyere risikovurderinger, hvis resultater allerede er accepteret af et større forum, skønnes behovet for en kritisk vurdering af flere datakilder at være minimal. Der kan således spares ressourcer på dette område.

Muligheden for udveksling af data fra mere ukendte værktøjer vurderes som meget begrænset. Udveksling af data fra MIPS til LCA er for eksempel begrænset til oplysninger om udvekslinger med miljøet på systemniveau, f.eks. i form af en specifikation af, hvor mange kilometer et givet produkt transporteres i sin levetid. Vurderingen af transporten sker med vidt forskellige metoder, hvor der ikke er sammenfald.

Analysen af materiale- og stofstrømme kan også indeholde *inventory*-oplysninger, f.eks. i form af opgørelse af udledninger fra enhedsprocesser. Det er imidlertid vanskeligt at deducere sig frem til, hvor man i givet fald skal finde oplysningerne. I princippet skal der regnes baglæns, forstået på den måde, at oplysninger om udledning af stoffer fra en bestemt proces skal følges op af en estimering af de producerede mængder, eventuelt suppleret med en eller anden form for allokeringssprocedure.

## 6.2 Praktiske erfaringer med kombination af værktøjer

Case-rapporten fra CHAINET-projektet indeholder eksempler på, hvordan de ovennævnte værktøjer (plus en række andre værktøjer) anvendes i praksis. Det er uden for dette projekts rammer at foretage en detaljeret gennemgang af eksemplerne.

Det konkluderes undervejs i automobil-casen, at et enkelt værktøj under normale omstændigheder ikke kan tilvejebringe den information, der er nødvendig for at træffe beslutninger. Flere værktøjer skal derfor anvendes i kombination for at opnå den tilstrækkelige viden. Udvælgelsen af relevante værktøjer og integration af deres resultater er i sig selv en proces, der kræver organisatoriske overvejelser.

Denne konklusion stemmer overens med de erfaringer, som mange virksomheder, der arbejder med LCA, også har fået. Uanset, om der gennemføres en fuld LCA eller en simplificeret LCA, er der behov for en supplerende vurdering af de praktiske implikationer, f.eks. i form af kundeaccept og andre økonomiske aspekter.

## 6.3 Konklusioner

CHAINET-rapporteringen giver et indblik i, hvordan forskellige værktøjer kan spille sammen på et teoretisk plan. De praktiske muligheder er forholdsvis dårligt beskrevet, og en præcis beskrivelse af muligheder for udveksling af data mellem forskellige værktøjer mangler.

Den største værdi af CHAINET-rapporterne ligger således i, at specialister fra forskellige miljøer får et første indblik i, hvordan andre specialister håndterer deres problemstillinger. Denne viden kan for eksempel bruges, når LCA-praktikere skal definere *Goal and Scope* for en LCA, således at resultaterne passer ind i det videre beslutningsforløb.

# 7 Workshop

Som afslutning på projektet blev der d. 24/4-2002 afholdt en workshop med ca. 20 deltagere. Workshopen havde følgende formål:

- Præsentere udvalgte resultater fra forprojektet
- Supplere med et overblik over andre aktiviteter på kemikalie- og LCA-området
- Diskutere, hvordan vi kan opnå en forbedret kvalitet i de kemikalierelaterede belastningskategorier i UMIP (og andre LCA-værktøjer)
- Diskutere, hvilke initiativer der på kort og langt sigt kan anbefales til Miljøstyrelsen

Programmet for workshopen var som følger:

- \*Leif Hoffmann, dk-TEKNIK: Fire små eksempler på, hvilken rolle emissions- og effektdata har i den samlede vurdering
- \*Jan Sandvig Nielsen, dk-TEKNIK: Kan værktøjer til procesoptimering give brugbare data til opgørelse i LCA?
- Michael Hauschild og Louise Dreyer, IPL: Brug af metoden til eksponeringsvurdering i TGD i LCA-opgørelser
- \*Anders Schmidt: Dataindholdet i EU's IUCLID-database – og muligheden for at lave brugbare udtræk
- \*Anders Schmidt, dk-TEKNIK: Elementer i EURAM – forskelle og ligheder i relation til UMIP.
- Ole Christian Hansen, Teknologisk: Anvendelse af QSAR til at udfylde datamangler – hvilke muligheder er der, og hvor stor er usikkerheden?
- Michael Hauschild, IPL: OMNIITOX-projektet – Hvilke resultater kan vi forvente – og hvornår?

De præsentationer, der er markeret med en "\*" var baseret på projektarbejdet, og det er stort set kun den efterfølgende diskussion, der refereres, idet det detaljerede indhold findes andetsteds i denne rapport. De øvrige præsentationer havde til formål at belyse udviklingen indenfor emner, der ikke var blevet berørt direkte i projektet, eller hvor der i løbet af projektperioden var fremkommet nye/yderligere initiativer og resultater.

## 7.1 Introduktion

Anders Schmidt introducerede kort forprojektets baggrund og indhold samt dagens program. Omkring baggrunden nævnte han, at toksikologiske og økotoksikologiske vurderinger i livscyklusperspektiv har stor interesse som beslutningsstøtte, men at metoderne havde nogle indbyggede svagheder, der gjorde at der ofte kom fokus på "mærkelige" enkeltfund i stedet for det samlede resultat. Som eksempel nævnte han, at udledninger af strontium fra kuludvinding var en dominerende enkeltfaktor i tidlige UMIP-vurderinger. Dette fund havde medført en mere dybtgående vurdering af denne specielle situation og en efterfølgende reduktion af stoffets effektfaktorer.



Ole Dall (COWI) foreslog, at man kunne lave et specielt index – ”Mulig Tox” – for situationer/stoffer, hvor der var en betydelig usikkerhed i datagrundlaget. Bidraget fra stofferne skulle naturligvis tælles med i det samlede billede, men ved at rapportere det i en særlig kategori ville man blive opmærksom på, at denne del af resultatet var behæftet med større usikkerhed. Anders Schmidt supplerede, at der i rapporten var stillet forslag om andre typer af index, der havde det samme formål, nemlig at fokusere på de mest relevante problemstillinger i en given LCA. Et af forslagene i rapporten er således en opdeling i henholdsvis energi- og procesrelaterede bidrag, hvilket giver bedre mulighed for industrien til at finde dens bidrag til problemer, hvor de selv har en relativ stor handlefrihed. De reelle muligheder for at lave sådanne index er ikke beskrevet i rapporten og blev heller ikke diskuteret yderligere på workshoppen.

## 7.2 Leif Hoffmann: ”Fire små eksempler...”

Som beskrevet i rapporten var de fire eksempler blevet etableret på baggrund af en hurtig screening af udvalgte problemstillinger. Det blev understreget, at de trufne valg ikke nødvendigvis var i overensstemmelse med best practice på LCA-området, men havde til formål at give en indikation af, om der kunne peges på brugbare tommelfingerregler for det pågældende anvendelsesområde.

Som beskrevet i rapporten, skønnes det ikke at være muligt at udarbejde sådanne tommelfingerregler. Dette blev da også bestyrket af den efterfølgende diskussion af to af eksemplerne, nemlig ”styren til polystyren” og ”ammoniak til gødning”.

I eksemplet ”styren til polystyren” var der i eksemplet regnet på, hvad det betød for bidraget til human- og økotoxicitet, hvis udledningen af hydrocarboner i APME’s opgørelser blev betragtet som styren. I eksemplet var bidraget til disse påvirkningskategorier ikke markant, men Frans Christensen (DTC) bemærkede, at hvis der i stedet blev regnet med at en del af emissionen var et mellemprodukt – benzen – i stedet for styren, ville der være et markant bidrag til human toksicitet.

I eksemplet ”ammoniak til gødning” stillede deltagerne sig skeptisk til, at et flygtigt stof som ammoniak virkelig kunne have så markant et bidrag til påvirkningskategorien persistent toksicitet. Blandt de mulige årsager blev det nævnt, at det ville være forkert, hvis hele ammoniakudledningen blev betragtet som en emission, idet landbrugsjorden skulle regnes som en del af technosfæren og dermed ikke en del af det økosystem, der påvirkes. Michael Hauschild (DTU) angav, at man normalt ville regne med, at kun 1% af den samlede gødningsmængde ville have uden for technosfæren. Dette var da også den fordeling, der var regnet med i eksemplet. Jens Otto Rasmussen (DHI) bemærkede, at ammoniak på gasform har en anden toksicitet end ammoniak i vandig form, og at det meste ammoniak findes i vandet. Årsagen til det store bidrag til persistent toksicitet skal måske snarere findes i de beregnede effektfaktorer for kronisk toksicitet i henholdsvis jord og vand, som er baseret på en række ældre undersøgelser af ammoniaks økotoxikologiske effekter. De refererede  $LC_{50}$  varierer med en faktor 100. Oplysningerne er fundet i Ecotox og HSDB, som begge refererer Vershueren, og det har ikke været muligt at verificere de anvendte værdier nærmere inden for projektets rammer. De valgte  $LC_{50}$ -værdier ligger midt i intervallet, hvilket betyder at en konservativ

tilgang ville have resulteret i endnu højere effektfaktorer og derved højere persistent toksicitet. Metoden til beregning af effektfaktorer er således meget følsom over for variationer i fx LC<sub>50</sub>-værdier ligesom den er følsom over for mangelfuldt dokumenterede data.

Eksemplerne og den efterfølgende diskussion viser således først og fremmest, at det er vigtigt at have et detaljeret kendskab til de produktionssystemer, der undersøges. Der kan opstå en stor usikkerhed eller fejl i beregningerne, både hvis man "glemmer" at samle kategorier som hydrocarboner kan dække over meget toksiske eller økotoksiske forbindelser, og hvis man ikke modellerer sit system, så det stemmer med de reelle forhold i produktionen. Erik Hansen (COWI) sagde konkluderende, at der var behov for et forum, hvor aktører indenfor området LCA og kemikalier kunne diskutere, hvordan forskelle i resultater af kemikalievurderinger håndteres bedst muligt.

### 7.3 Jan Sandvig Nielsen: "Værktøjer til procesoptimering"

Jan Sandvig Nielsen lagde i sin præsentation først og fremmest vægt på mulighederne for at bruge procesoptimering til at producere opgørelses-data til brug i LCA. Et eksempel viste, hvordan energiforbruget til stripping af ethanol i spildevand kan optimeres gennem en række beregninger. Hvis der således er viden om, hvor meget ethanol, der er i spildevandet før og efter rensningen, kan energiforbruget og de dermed relaterede emissioner beregnes. Et andet eksempel viste, hvordan man ved brug af procesoptimeringsværktøjer havde kunnet designe salpetersyreanlæg, der havde et større overskud af energi, der kan udnyttes i andre systemer, samtidigt med et lavere udslip af NOx.

Princippet i procesoptimering - at man i et iterativt forløb kombinerer faste stof- og procesparametre med ukendte variable og dermed opnår en energieffektiv løsning - vil kunne anvendes på stort set alle kemiske processer. Der kan dog være tale om forholdsvis kostbare løsninger, da værktøjerne dels er dyre og dels kræver en oplæringsperiode. Jan Sandvig Nielsen anslog tidsforbruget til modellering til at være 1-2 uger per proces - og lidt mindre, når der var tale om flere sammenhængende processer.

Bo Weidema (2.-0 Consultants) spurgte, om de også kunne anvendes på raffinaderier, hvor der ofte er tale om variable output fra komplekse processer. Formålet skulle være at få en mere præcis opgørelse af energiforbruget til produktion af de enkelte fraktioner gennem en analyse af marginale output. Jan Sandvig Nielsen fortalte, at procesoptimering af raffinaderier var meget almindelig, og at man ofte valgte at lade en eller flere kilder til miljøbelastning indgå i produkter, hvor der ikke er regulering, f.eks. ender svovl ofte i bunkerolie. Med hensyn til at beregne miljøbelastningen for hvert enkelt produkt gennem en marginalberegning var Jan Sandvig Nielsen lidt skeptisk, idet der i det virkelige liv ikke vil blive gjort sådanne overvejelser. Efter en kort diskussion blev det dog konkluderet, at det var muligt at foretage sådanne beregninger med de eksisterende værktøjer.

Frans Christensen (DTC) sagde, at de fleste producenter af kemikalier gennemførte sådanne optimeringer, og at der sandsynligvis er mange data hos producenterne. Michael Hauschild bekræftede dette ud fra egne erfaringer, men der var enighed om, at det var forbundet med store vanskeligheder at få adgang til disse oplysninger.

#### 7.4 Michael Hauschild/Louise Dreyer: "Estimation af opstrøms emissioner i LCA"

I sin introduktion fortalte Michael Hauschild kort om EU's Technical Guidance Document (TGD) og European Union System for Evaluation of Substances (EUSES), der er de officielle værktøjer ved miljørisikovurdering i EU. Michael Hauschild fremhævede, at det indbyggede konservative præg i denne type værktøjer gjorde dem til et godt dialogværktøj i en LCA-verden, hvor der er mange kemikalier, få LCI-data og en ringe vilje fra producentside til at levere de ønskede data.

EU's Technical Guidance Document (TGD) til risikovurderinger indeholder et sæt grove emissionsfaktorer for estimering af udledninger ved forskellig brug af kemiske stoffer (se xxx). TGD indeholder derudover et væsentligt mere detaljeret sæt emissionsfaktorer, der giver mulighed for at estimere udledninger ved brug af kemikalier i forskellige processer og i forskellige brancher (Technical Guidance Document, Kapitel 3, Appendix 1: Emission factors for different use categories). Disse faktorer bruges blandt andet i EU's model for risikovurderinger (EUSES), og findes derfor også i appendix til dette dokument (EUSES Appendix IV). TGD-dokumentet kan downloades fra internettet fra adressen <http://ecb.jrc.it/existing-chemicals/>.

Udledningsfaktorerne beregnes på baggrund af fysisk-kemiske egenskaber for de enkelte stoffer, kombineret med en ekspertvurdering af processernes potentiale for at skabe udledninger. Da faktorerne bruges i risikovurdering, må det grundlæggende antages, at de giver et konservativt estimat.

Louise Dreyer fortalte derefter om et konkret eksempel på anvendelse af beregninger efter TGD-retningslinier, nemlig estimering af opstrømsmissioner ved produktion af lak.

Udgangspunktet for opgørelsen var en lak-recept med identifikation af de enkelte råvarer. Hver enkelt af disse blev derefter fulgt opstrøms, hvor brancher, processer og mellemprodukter blev identificeret ved hjælp af teknisk litteratur som Kirk-Othmer og Ullmans' Encyclopædi samt information fra leverandører og fagfolk. De fysisk-kemiske egenskaber for stofferne (vandopløselighed og damptryk) blev bestemt ud fra oplysninger i litteratur, sikkerhedsdatablade, leverandøroplysninger, QSAR eller analogi til lignende stoffer.

Med oplysninger om input til de forskellige opstrømsprocesser og fysisk-kemiske egenskaber er det med default-værdierne fra TGD-dokumentationen muligt at beregne, hvor store udslip der er af enkeltstoffer fra de fleste opstrømsprocesser. I det konkrete projekt blev der ved hjælp af proceduren opstillet opstrømsdata for 30 ud af 45 processer, og i den sidste ende blev elleve af disse inkluderet i den efterfølgende impact assessment. Nogle processer blev udeladt, fordi de ikke var relevante, mens andre blev ekskluderet, fordi der ikke var emissionsfaktorer for den pågældende processtype i TGD-dokumentationen.

Resultatet af opgaven var, at en lang række huller i opgørelsen af lakkens livsforløb blev dækket med information om procesrelaterede udledninger. Erfaringerne viser, at der skal gøres et stort arbejde for at identificere, hvilke processer, der rent faktisk finder sted opstrøms i livsforløbet, og at der ofte er tale om en række forskellige muligheder for at producere de enkelte stoffer. Metoden kræver derfor et bredt kendskab til den kemiske industri.

Præsentationen vakte stor interesse på workshoppen, og Erik Hansen (COWI) så gerne, at resultaterne blev publiceret. Louise Dreyer sagde, at mange af resultaterne var fortrolige i den nuværende form, men at der var udarbejdet en manual, der var offentlig tilgængelig. Ole Dall (COWI) spurgte om acceptniveauet for denne type af vurderinger. Det er generelt højt, men man skal være klar over at de fleste udledningsfaktorer i TGD er ekspertbaserede. Ole Christian Hansen (TI) fortalte, at faktorerne i stor udstrækning er hollandske, og baserede på Best Available Technology (BAT). Mange europæiske producenter har i dag emissioner, der er mindre end beregnet ved hjælp af TGD, men udenfor Europa kan der findes producenter, der har væsentligt højere emissioner per produceret enhed. Ole Christian Hansen fortalte endvidere, at der arbejdes kontinuerligt med at forbedre vurderingen af emissionernes størrelse, og at der allerede fandtes en række såkaldte Emission Scenario Documents (ESD) i relation til TGD, hvor der findes en række færdige beregninger. I disse er der foretaget en samlet vurdering af en række teknologier, hvor der blandt andet tages hensyn til produktionsstedernes størrelse. Det skal dog også bemærkes, at det ofte er kerneprocesserne, der er i fokus i ESD. Dette betyder for eksempel, at der i vurderingen af farve-lak branchen ikke er foretaget en vurdering af de emissioner, der forekommer opstrøms for formuleringen. I disse tilfælde er det således nødvendigt at følge proceduren i TGD for den kemiske basisindustri, som er beskrevet af Louise Dreyer for at få et komplet billede.

Anders Schmidt afsluttede formiddagens program med at konstatere, at med de procedurer, der var beskrevet i de to sidste præsentationer, var det teoretisk muligt at lave opgørelser for kemikalieproduktion, baseret alene på de tekniske specifikationer for processen. Der vil på samme måde som for "almindelige" opgørelser være tale om en del usikkerhed, idet valg af forskellige opstrømsprocesser ved produktion af et givet kemikalie kan give meget forskellige resultater.

#### 7.5 Anders Schmidt: "Dataindhold i IUCLID/ Elementer i EURAM"

Anders Schmidt gav et overblik over resultaterne af den detaljerede gennemgang af IUCLID of EURAM, som er hovedindholdet i denne rapport. Hovedkonklusionen omkring IUCLID var, at databasen ikke egner sig som et grundelement i en udvidelse eller forbedring af UMIP's database med effektfaktorer, men at den på grund af sin nemme tilgængelighed og relativt store datamængde måtte betegnes som et værdifuldt supplement i konkrete stofvurderinger. Omkring EURAM var hovedkonklusionen, at der er et stort overlap i datakrav og vurderingsmetoder på effektsiden, mens der på eksponeringssiden var forskelle, f.eks. i form af EUSES' brug af en Mackay-model til at beregne fordelingen i forskellige delmiljøer og dermed også andre krav til de data, der anvendes.

Henrik Fred Larsen (IPU) kommenterede, at forskellen i eksponeringsvurdering ikke var så markant, idet UMIP-modellen anvender de samme oplysninger, som kræves i EUSES, bare på andre stadier af vurderingsproceduren. Han fortalte desuden kort om sit Ph.D.-projekt, hvor der er en stor fokus på at finde eller udarbejde metoder til udvælgelse af kemiske stoffer, der skal have en mere dybtgående vurdering i en LCA. Udgangspunktet for dette arbejde var SETAC's rapport om Chemical Ranking and Scoring, hvor der foruden en beskrivelse af en lang række

værktøjer også findes en beskrivelse af de rammer, som værktøjer til ranking og scoring skal ligge indenfor.

#### 7.6 Ole Christian Hansen (TI): "Anvendelse af QSAR ved datamangel"

Ole Christian Hansen beskrev i sit indlæg, hvordan udviklingen af QSAR-metoder var steget nærmest eksponentielt i de seneste år. SAR (Structure Activity Relationships) har været anvendt i mange år af producenter af farmaceutiske stoffer, pesticider og farvestoffer til udvikling af nye produkter, idet et stofs iboende egenskaber og molekylære deskriptorer kan korreleres med andre egenskaber. I modsætning til SAR er QSAR kvantitativ, og giver mulighed for ved matematiske ligninger at estimere forskellige værdier, f.eks. for fysisk-kemiske egenskaber (vandopløselighed, damptryk), skæbne i miljøet (Kow, bionedbrydning, bioakkumulering) og toksicitet (human og økotoksicitet).

En QSAR-model opbygges ud fra et test-sæt, hvor målte værdier for en bestemt egenskab hos en række stoffer korreleres til molekylære deskriptorer. Denne korrelation kan derefter bruges til at estimere den samme egenskab hos stoffer indenfor samme stofgruppe, for hvilke, der ikke er målte værdier. Ole Christian Hansen fremhævede, at man først og fremmest skulle kende domænet for den valgte QSAR-model, d.v.s. hvilke stofgruppe(r), den er udviklet for. Men man skulle også være opmærksom på hvilke faktorer, der indenfor domænet begrænser et test-sæts prediktive evne, f.eks. molekylvægt, log Kow og pH-værdi. Hvis man ikke kender disse begrænsninger eller anvender modellerne ukritisk, er der en meget stor risiko for at få forkerte vurderinger.

De fleste QSAR-modeller er baseret på oktanol/vand-fordelingskoefficienten, hvilket blandt andet afspejler sig i opdelingen af QSARs med forskellige ligninger for ikke-polære narkotiske stoffer og polære narkotisk virkende stoffer. Ole Christian Hansen bemærkede, at QSAR ikke var egnet til at forudsige specifikke virkninger.

Præsentationen omfattede også en kort gennemgang af de modeller, som Miljøstyrelsen havde anvendt ved udarbejdelse af deres vejledende liste til selvklassificering af farlige stoffer (se også Miljøprojekt Nr. 635/636 (2001) og afsnit xxx). Miljøstyrelsens database indeholder 3-D strukturer for 166.000 kemiske stoffer, og er dermed et solidt udgangspunkt for anvendelse af både gamle og nye modeller. Listen til selvklassificering indeholder QSAR-forudsigelser omkring fysisk-kemiske egenskaber, skæbne i miljøet (nedbrydelighed, BCF, log Kow), økotoksicitet for fisk, daphnier og alger (v.h.a. blandt andet ECOSAR og M-CASE) og toksicitet overfor pattedyr (v.h.a. blandt andet M-CASE og TOPKAT).

Afslutningsvis fortalte Ole Christian Hansen, at nye modeller under udvikling blandt andet i Bulgarien vil kunne give en øget præcision og sikkerhed i vurderingen, fordi de vil blive baseret på et langt større basismateriale og fordi der også vil blive taget hensyn til stoffernes nedbrydningsprodukter. Der vil således i fremtiden blive bedre mulighed for en validering af de eksisterende modeller og data og for krydscheck mellem modeller, ligesom modeller for flere effekter er under udvikling. Endelig anbefalede Ole Christian Hansen, at QSAR ikke lægges ind i (LCA-) modeller, men anvendes udenfor, hvor resultatet kan valideres før anvendelse. Man skulle også undgå brug af gamle data, idet nye modeller generelt var væsentligt bedre end tidligere modeller.

I diskussionen var hovedspørgsmålet, hvor præcise QSAR-vurderinger var, f.eks. i relation til kronisk toksicitet overfor fisk. Ole Christian Hansen svarede, at ECOSAR-modellen "ikke var så ringe endda", men det var uklart om præcisionen var tilstrækkelig til at reducere den vurderingsfaktor, der anvendes i UMIP til at kompensere for manglende data.

#### 7.7 Michael Hauschild: "OMNIITOX-projektet"

Michael Hauschild, IPU, fortalte i det sidste indlæg om instituttets deltagelse i OMNIITOX-projektet. Projektet, hvis navn er et akronym for "Operational Models aNd Information tools for Industrial applications of eco/**TOX**icological impact assessments" - er finansieret af EU under det femte rammeprograms område "Sustainable Growth". Baggrunden for projektet er, at der tilsyneladende er forskelle i de resultater, som opnås ved henholdsvis risikovurdering (ERA) og LCA, hvilket kan give anledning til forvirring omkring gyldigheden af visse typer af beslutning. Projektet dækker således bredere end Life Cycle Impact Assessment (LCIA), hvilket også fremgår af de overordnede formål:

- Belysning af ligheder og forskelle mellem karakterisering af farlige stoffer i LCIA og ERA
  - o Anbefalinger om anvendelsesområder og kommunikation af resultater
- Belysning af ligheder og forskelle i LCIA metoder til karakterisering af farlige stoffer
  - o Udvikling af kriterier og identifikation af Best Practice
- Udvidelse af gyldighedsområdet for LCIA-metoder, f.eks. med hensyn til uorganiske stoffer, speciering af stoffer, stedafhængighed samt udvælgelsesmetodeer (selection methods)
- Udarbejdelse af et web-baseret informationssystem omkring LCIA/ERA for at øge datatilgængelighed og kvalitet
- Udarbejdelse af baggrund for en mulig inddragelse af LCA ved myndigheders vurdering af kemiske stoffer

Projektet omfatter elleve partnere, herunder fire "stakeholder-virksomheder" der hver især får en tilbundsående vurdering af en relevant case, og en myndighed (Joint Research Centre i Ispra) med stor erfaring i risikovurdering og opbygning/vedligehold af databaser om kemiske stoffer. IPU er den eneste danske deltager i projektet, der i alt har deltagelse af virksomheder og institutioner fra seks lande (DK, D, S, CH, E, I).

Med udgangspunkt i de fire cases opbygges grundlaget for sammenligning og nyudvikling af metoder. Deltagelsen af de industrielle partnere sikrer, at cases er anvendelsesorienterede og giver løsninger på konkrete problemstillinger, mens deltagelse af fem akademiske partnere sikrer, at resultaterne bliver generelt anvendelige. De fem akademiske partnere har alle været deltagere i opbygning af nationale metoder til LCIA, ligesom de har deltaget i relevante arbejdsgrupper under SETAC. Michael Hauschild understregede, at alle partnere var meget ambitiøse omkring hvilke metoder, der ville blive anbefalet, og at UMIP i sin nuværende form var meget enkel i sine datakrav i forhold til de metoder, som de andre akademiske partnere havde udviklet. Der kunne derfor meget vel blive tale om en væsentlig forøgelse af datakrav i en kommende metode, men også at deltagelsen af Joint Research Centre var med

til at sikre, at kravene ville være realistiske at få opfyldt, når metoden skulle operationaliseres.

Med hensyn til LCIA vil projektet forsøge at arbejde hen mod en meget omfattende fælleseuropæisk metode med en modulær opbygning (specifikke metoder til forskellige stofgrupper) og mulighed for stedspecifikke vurderinger. Hvis dette lykkes, er det hensigten at udarbejde "færdige" vurderinger for et test-sæt på omkring 80 stoffer. Der vil også blive arbejdet på at lave en mere simpel metode, som vil kunne anvendes hvis der ikke bliver enighed om en fælles, omfattende metode. Det er hensigten, at den mere simple metode i givet fald skal have vurderet omkring 5000 stoffer ved projektets afslutning. Endelig vil projektet også omfatte en fælles europæisk metode til udvælgelse af kemiske stoffer, der er af speciel relevans i en given LCA.

Projektet, der har et samlet budget på 3.3 mio EURO, forventes at være afsluttet medio 2004 med diverse rapporter, en bog og et web-baseret informationssystem som de væsentligste synlige resultater. I projektperioden kan yderligere oplysninger ses på projektets hjemmeside <http://www.omniitox.net/>.

I diskussionen spurgte Anders Schmidt, hvilke muligheder danske LCA-udførere havde for at få indflydelse på projektets resultater. Michael Hauschild svarede, at det ikke var normalt i EU-projekter, at institutioner udenfor et projekt fik indflydelse på projektførelsen. Bo Weidema spurgte, hvad danske LCA-eksperter kunne bidrage med, hvortil Jens Otto Rasmussen (DHI) svarede, at vi vel altid kunne bidrage med data. Ole Dall foreslog, at der blev lavet et dansk support-projekt, der kunne indbyde danske LCA-brugere til at afprøve de nye metoder og Bo Weidema understregede, at det er væsentligt at få det nye dataformat på bordet så tidligt som muligt, så nye indsamlinger af data kunne målrettes bedst muligt. Der blev også spurgt til den fremtidige anvendelse af det web-baserede informationssystem, herunder til prisen. Der var ikke taget beslutninger desangående, men det var oplagt, at det ville være forbundet med omkostninger at vedligeholde et sådant system, så en form for brugerbetaling kan nok ikke undgås.

## 7.8 Thomas P. Krog, Produktregistret

Thomas P. Krog fra Produktregistret fortalte udenfor workshoppens egentlige program om de muligheder, der er for at lave udtræk fra Produktregistrets database, PROBAS, med særligt henblik på LCA.

PROBAS er en kemikaliedatabase, som indeholder oplysninger om kemiske produkter, kemiske stoffer og virksomheder, som markedsfører kemiske stoffer og produkter. Fra registret er det muligt at lave detaljerede udtræk på en lang række punkter, også i kombination, f.eks.:

- Produkter: Navn, PR-nr., sammensætning, funktion, industriel anvendelse (f.eks. branchekoder), mængde, klassificering og mærkning
- Stoffer: Navn, CAS-nr., EF-nr., klassificering og mærkning, §7-klassificering og regulering

Oplysninger, som direkte knytter sammensætningen eller mængden af et produkt til et bestemt produkt- eller firmanavn er fortrolige og må ikke

offentliggøres. Oplysninger om et stofs anvendelse i en bestemt type af produkter eller i en bestemt branche kan offentliggøres, hvis stoffet findes i mindst tre produkter af samme type, eller hvis stoffet findes i mindst tre produkter, som anvendes i den samme branche. I tilfælde, hvor samtlige data i et udtræk viser sig at være fortrolige, kan Produktregistrets personale lave "maskeringer", således at dele af data eller "data-trends" alligevel kan offentliggøres.

I relation til prioritering af, hvilke stoffer et LCA-værktøj bør dække, er data fra Produktregistret ofte relevante. F.eks. kan man udtrække lister over hvilke stoffer, der anvendes mest af, fordelt på ton og antallet af produkter stofferne indgår i. Lister af denne type kan udbygges med kriterier om stoffernes farlighed (klassificering, typen af produkter stofferne findes i, samt deres industrielle distribution.

Workshoppens deltagere bød disse muligheder velkommen, men det var ikke muligt indenfor workshoppens tidsrammer at diskutere de skitserede muligheder i detaljer.

## 7.9 Afsluttende diskussion og anbefalinger

Som det fremgår af beskrivelsen af OMNIITOX-projektet, kan der være tale om at en helt ny metode ser dagens lys i løbet af en overskuelig fremtid. I fald det lykkes, må det forventes at dansk industri vil være godt tjent med en fælleseuropæisk metode, idet dette længe har været et ønske.

Der var på workshoppen et bredt ønske om at blive holdt orienteret om udviklingen i OMNIITOX-projektet. En løbende orientering vil betyde, at danske LCA-udøvere og danske virksomheder vil være bedre klar til at anvende den nye metode, ligesom der kan være mulighed for at iværksætte støtteprojekter, f.eks. vedrørende dataindsamling. Erfaringer fra UMIP-projektet viser, at det er et stort arbejde først at skabe accept for en metode og derefter få den implementeret i det praktiske LCA-arbejde. Med en god orientering og forberedelse er det således muligt, at både danske virksomheder og LCA-udøvere får mulighed for tidligt at udnytte resultaterne af det store arbejde. Det foreslås derfor, at Miljøstyrelsen allokerer midler til en sådan informationsaktivitet. Midlerne kan for eksempel kanaliseres via et kommende LCA-Videncenter, hvor det forventes at IPU vil være en af partnerne, og hvor dansk industri vil have en naturlig plads i bestyrelsen, der vil skulle fastsætte rammerne for en sådan aktivitet. Et kommende Videncenter bør også tage hensyn til de nye perspektiver, når der tages beslutning om integration af den nuværende UMIP-metode i et nyt PC-baseret værktøj.

På denne baggrund er denne rapportes forslag til initiativer omkring udvidelser og forbedringer af den nuværende metode og database umiddelbart af mindre vigtighed. Anbefalingerne fastholdes dog for det tilfælde, at der fra centralt hold ønskes at arbejde videre med den nuværende UMIP-metode, indtil der tegner sig et mere tydeligt billede af OMNIITOX-projektets resultater og eventuelle konsekvenser for det danske LCA-arbejde.

Forprojektets forslag om opbygning af et fælles rapporteringsformat ved udarbejdelse af effektfaktorer til brug i UMIP vil således kun have interesse, hvis der ikke sker signifikante metodeændringer. På samme måde har en konsolidering og udvidelse af antallet af effektfaktorer kun marginal interesse,



idet det med et positivt resultat af OMNIITOX-projektet vil være naturligt at anvende denne metode i fremtiden.

Indtil en ny metode eventuelt er på plads, må det forudses at danske LCA-udøvere vil arbejde videre efter den eksisterende. Workshoppen viste her, at anvendelse af QSAR har sin berettigelse, når der ikke foreligger eksperimentelle data. Dette gælder især på økotoksicitetsområdet, hvor der ofte er mulighed for en kvantificering, mens der for human toksicitet alene er mulighed for en kvalitativ vurdering af belastningen i forskellige end-points. Der fremkom ikke konkrete forslag til, hvordan QSAR kan integreres på en måde, således at vurderingerne bliver mere præcise, men det må formodes, at også dette aspekt vil blive dækket i OMNIITOX-projektet.

Workshoppens deltagere så meget positivt på de muligheder, der efter workshoppen tegnede sig med hensyn til danske initiativer for at forbedre opgørelsesdelen i LCA. Jan Sandvig Niensens præsentation viste, at det var muligt at beregne energi- og ressourceforbrug i kemiske processer på et højt detaljeringsniveau, og Louise Dreyers indlæg viste, at det ved hjælp af TGD-modellen og dens default-værdier var muligt at estimere udslip fra de mange kemiske processer i industriel skala. Et dansk projekt, der omfatter den ene eller begge af de ovenstående elementer, vil kunne give et væsentligt bidrag til mere præcise livscyklusvurderinger af kemiske processer. Selvom begge metoder må anses for forholdsvis tidskrævende, er der i høj grad tale om engangsarbejde, hvor resultaterne vil være gyldige i lang tid fremover.

Afslutningsvis pegede Henrik Fred Larsen på vigtigheden af at arbejde videre med prioritering- eller udvælgelsessværktøjer, således som sker i hans Ph.D.-studie. Der fremkom ikke på workshoppen forslag til yderligere aktiviteter, der kan støtte op omkring dette arbejde, men det kunne tænkes at være en del af et kommende LCA-Videncenters opgave at pege på muligheder, der er interessante for centrets målgrupper.

## 7.10 Deltagerliste til workshoppen

Navn	Firma/Institut	e-mail adresse
Bo Weidema	2.0 LCA Consultants	bow@lca.dk
Hanne Krogh	By & Byg	hmk@by-og-byg.dk
Ole Dall	COWI	old@cowi.dk
Erik Hansen	COWI	ehn@cowi.dk
Jens Tørslev	DHI	jet@dhi.dk
Jens Otto Rasmussen	DHI	jor@dhi.dk
Christian Helweg	DHI	chh@dhi.dk
Leif Hoffmann	dk-TEKNIK	lho@dk-teknik.dk
Jan Sandvig Nielsen	dk-TEKNIK	jsn@dk-teknik.dk
Anders Schmidt	dk-TEKNIK	asc@dk-teknik.dk
Frans Møller Christensen	DTC	fmc@dtc.dk
Dorthe Nørgaard Andersen	DTC	dna@dtc.dk
Ole Chr. Hansen	DTI	ole.christian.hansen@teknologisk.dk
Kirsten Pommer	DTI	kirsten.pommer@teknologisk.dk
Henrik Fred Larsen	IPU, DTU	hfl@ipl.dtu.dk
Michael Hauschild	IPU, DTU	mic@ipl.dtu.dk
Louise Dreyer	IPU, DTU	lylcd@hartmann.dk
Christian Poll	Miljøstyrelsen (nu IPU, DTU)	cp@ipu.dk
Thomas P. Krog	Miljøstyrelsen	tpk@arbejdstilsynet.dk
Ninkie Bendtsen	Erik K. Jørgensen (MST)	nib@EKJ.dk

# Referencer

Allanou R, Hansen BG, van der Bilt Y (uden år). Public availability of data on EU High Production Volume Chemicals. European Commission, Joint Research Centre, Italy.

Andersen JM, Sommer SG, Hutching NJ, Kristensen VF, Poulsen HD (1999). Emission af ammoniak fra landbruget - status og kilder. Danmarks Miljøundersøgelse & Danmarks Jordbrugsforskning.

Bakemeier H, Huberich T, Krabetz R, Liebe W, Schunck M, Mayer D (1994). Ammonia. In Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry. John Wiley & Sons. Volume A 2.

Boustead I (1998). Eco-profiles of the European polymer industry. Report 6: Polyvinyl chloride. APME and ECVI. Second edition.

Boustead I (1999). Eco-profiles of plastic and related intermediates. APME. <http://lca.apme.org/reports>.

Brentrup F, Küsters J, Lammel J, Kuhlmann H (2000). Methods to estimate on-field nitrogen emissions from crop production as an input to LCA studies in the agricultural sector. Int. J. LCA 5(6):349-357.

Cabezas H., Bare J.C., Mallick S.K., *Comp. Chem. Eng.*, 1999, **23**, 623-634

Carpenter CE, Lewis CR, Crenshaw WC (1990). Estimating emissions from the synthetic organic chemical manufacturing industry: an overview. Toxic Substances Journal 10:323-371.

CEC (1967). Commission of the European Communities. Approximation of the laws, regulations and administrative provisions relating to the classification, packaging and labelling of dangerous substances. Council Directive 67/548/EEC af 18. august, 1967.

CEC (1993). Commission of the European Communities. Evaluation and control of risks of existing substances. Council Regulation 793/93/EEC af 23. marts, 1993.

ECB (1997). European Union System for the Evaluation of Substances. Joint Research Centre, Ispra.

EFMA (European Fertilizer Manufacturers' Association), Best Available Techniques for Pollution Prevention and Control in the European Fertilizer Industry, Booklet 2 of 8, Production of Nitric Acid, 2000.

EU (1996). Technical guidance document in support of Commission Directive 93/67/EEC on risk assessment for new notified substances and Commission Regulation (EC) No. 1488/94 on risk assessment for existing chemicals.

- EU (1999a). ECB 4/01/99 (1999). European Commission. Joint Research Centre. From IUCLID to priority lists: The EURAM rankings.
- EU (1999b). ECB 4/01/99 (1999). European Commission. Joint Research Centre. From IUCLID to priority lists: Commenting on the EURAM rankings..
- EU (1999c). ECB 4/01/99 (1999). European Commission. Joint Research Centre. From IUCLID to priority lists: Preparing the working lists..
- European Commission (2000). Joint Research Centre. IUCLID CD-ROM. Year 2000 edition. Public data on high volume chemicals. EUR 19559 EN.
- Fenhann J, Kilde NA (1994). Inventory of emissions to the air from Danish sources 1972-1992. Roskilde: Systems Analysis Department, Risø National Laboratory.
- Hansen BG *et al.* (1999). Priority setting for existing chemicals: European Union risk ranking method. *Environ. Toxicol. Chem.* Vol 18(4):772-779.
- Hauschild M (ed.) (1996). Baggrund for Miljøvurdering af produkter, Miljøstyrelsen/Dansk Industri 1996.
- Hauschild M, Wenzel H (1998). Environmental Assessment of Products. Chapman-Hill, London, England.
- Heijungs R (editor) 1992. Environmental life cycle assessment of products. Backgrounds and Guide. CML, Leiden, Holland.
- Huijbregts MAJ (1999). Priority assessment of toxic substances in the frame of LCA. Development and application of the multi-media fate, exposure and effect model USES-LCA. University of Amsterdam, Holland. Kan downloades fra <http://www.leidenuniv.nl/interfac/cml/lca2/index.html>
- James DH, Castor WM (1994). Styrene. In Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry. John Wiley & Sons. Volume A 25.
- Jiménez-González C, Kim S, Overcash MR (2000). Methodology for developing gate-to-gate life cycle inventory information. *Int. J. LCA* 5(3):153-159.
- Kosaric N, Duvnjak Z, Farkas A, Sahm H, Bringer-Meyer S, Goebel O, Mayer (1994). Ethanol. In Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry. John Wiley & Sons. Volume A 9.
- Maag J (1998). Massestrømsanalyse for dichlormethan, trichlorethylen og tetrachlorethylen. Miljøprojekt nr. 392. København: Miljøstyrelsen.
- Maul J, Frushour BG, Kontoff JR, Eichenauer H, Ott K-H (1994). Polystyrene and styrene copolymers. In Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry. John Wiley & Sons. Volume A 21.
- Miljøprojekt Nr. 635 (2001) (Uden forfatter). Rapport om Vejledende liste til selvklassificering af farlige stoffer. Miljøstyrelsen.

Mortensen B, Hauschild M, Weidema B, Nielsen P, Schmidt A, Christensen BH (1997). Livscyklusvurdering af produkter baseret på fornybare råvarer. Institut for Produktudvikling.

Nielsen, J.S., Energy optimization of integrated process plants, Ph.D. afhandling, Institut for Kemiteknik, DTU, 1995.

Nielsen og Hansen, Comparative study – Saturated versus conventional nitric acid process, dk-TEKNIK 1997 (Confidential report).

Pistikopolous E.N; Stefanis S.K., *Comp. Chem. Eng.*, 1998, **22**, 717-733

Richards IR (2000). Energy balances in the growth of oilseed rape for biodiesel and of wheat for bioethanol. British Association for Bio Fuels and Oils (BABFO).

Rosberg M, Lendle W, Tögel A, Dreher E-L m.fl. (1994). Chlorinated hydrocarbons - Tetrachloroethylene. In Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry. John Wiley & Sons. Volume A 6.

TSA Group Delft bv (1997). EUSES - the European Union System for the Evaluation of substances. EUSES 1.00 User manual.

Tukker A (1998). Uncertainty in life-cycle impact assessment of toxic releases. *Int. J. LCA* 3(5): 246-258.

Wrisberg *et al* (editors) (2000). Analytical tools for environmental design management in a systems perspective. CML, Leiden, Holland.