

REACH in der Praxis

25.09.2012

Bundespresseamt, Berlin

Nannett Aust

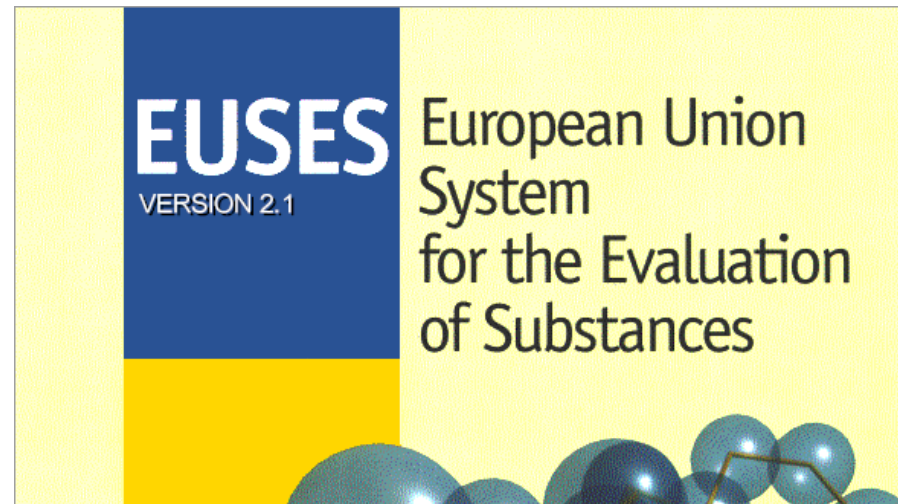
**Umweltbundesamt
Fachgebiet Chemikalien
Wörlitzer Platz 1
06844 Dessau-Roßlau**



4. Fachworkshop

Instrumente zur umweltbezogene Risikobewertung

EUSES



- Was brauche ich?
Was geht in das Programm ein?
- Wo muss ich selbst nachdenken, z. B.
Auswahl von Emissionsfaktoren
- Was mache ich mit dem Output
- Verdeutlichung Zusammenhang zwischen
Modell (in Guideline beschrieben,
Standardannahmen des Modells, fate
Annahmen) und dem Tool

Was ist EUSES?

- European Union System for the Evaluation of Substances
- Tool zur schnellen und vereinfachten Abschätzung von Risiken von Chemikalien gegenüber der Umwelt und Personen über den Umweltpfad

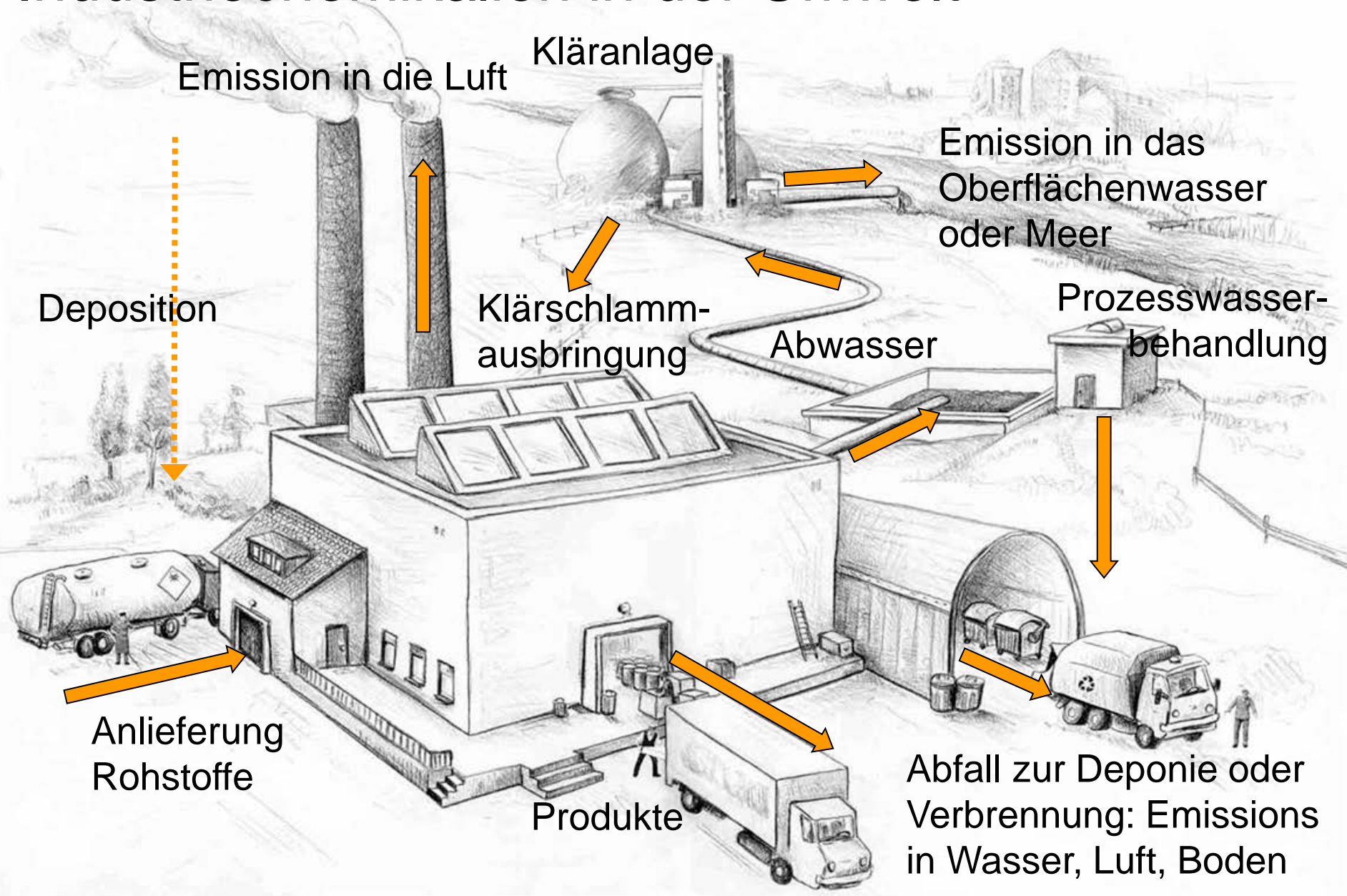
Was ist EUSES?

- Entwickelt von RIVM und EU-Kommission
- Bereit gestellt von „Joint Research Centre“ (JRC)
- Basiert auf EU Technical Guidance Documents (TGD), Teil II, 2003
- Neuste Version EUSES 2.1.2 (2012)

Schwerpunkt EUSES und Schnittstellen

- Schwerpunkt des Programms: Berechnung möglicher Expositionen in verschiedenen Umweltkompartimenten
- Möglich: potenzielle Expositionen von Arbeitern und Verbrauchern zu berechnen
- „EUSES“ ist ein Tool für Experten und erfordert eine eingehende Einarbeitung in die Modelle und die Software

Industriechemikalien in der Umwelt



Lokale Expositionsschätzung

Industrieanlage

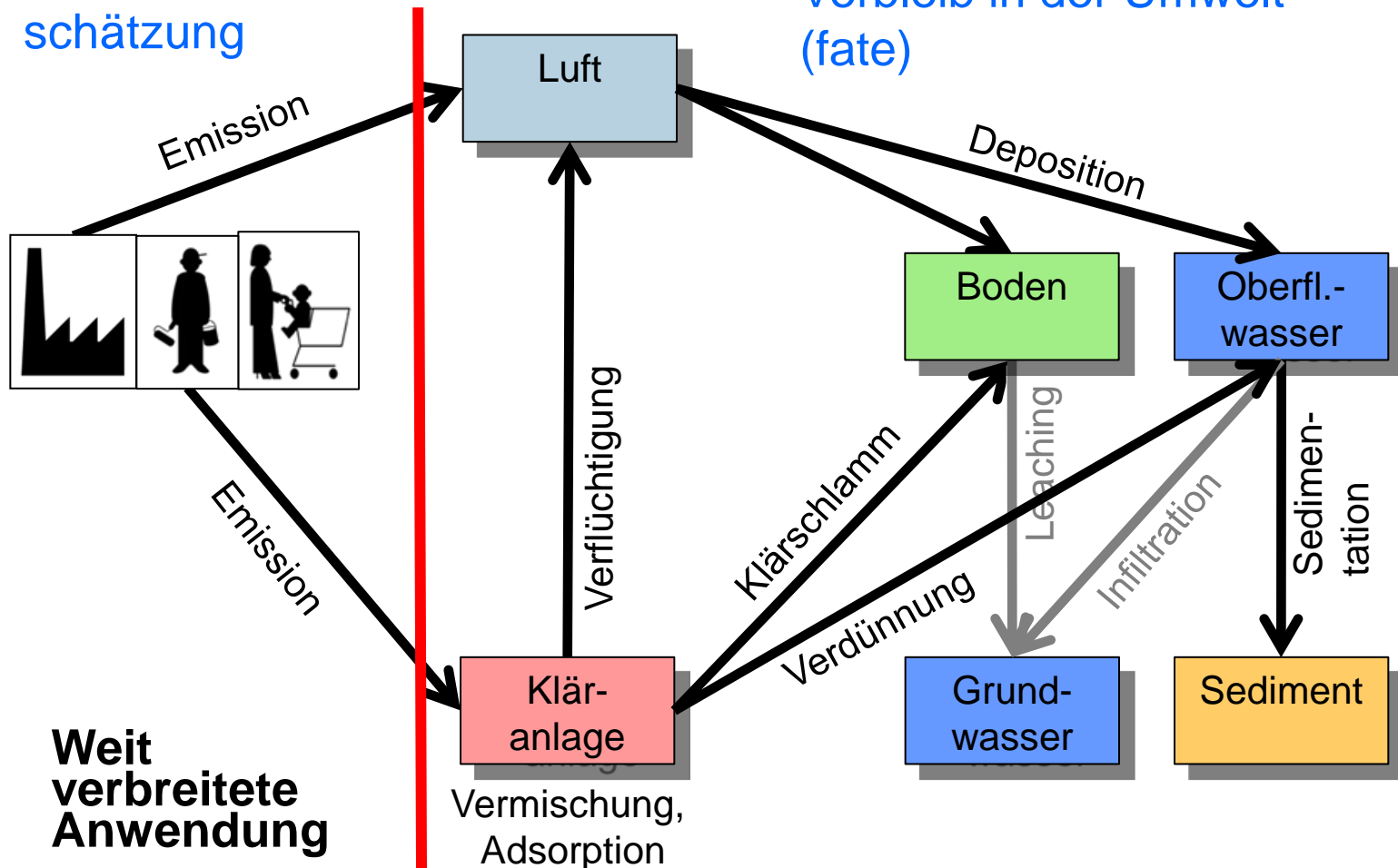
Emissions-
schätzung

Beurteilung Verhalten und
Verbleib in der Umwelt
(fate)

Expositions-
abschätzung

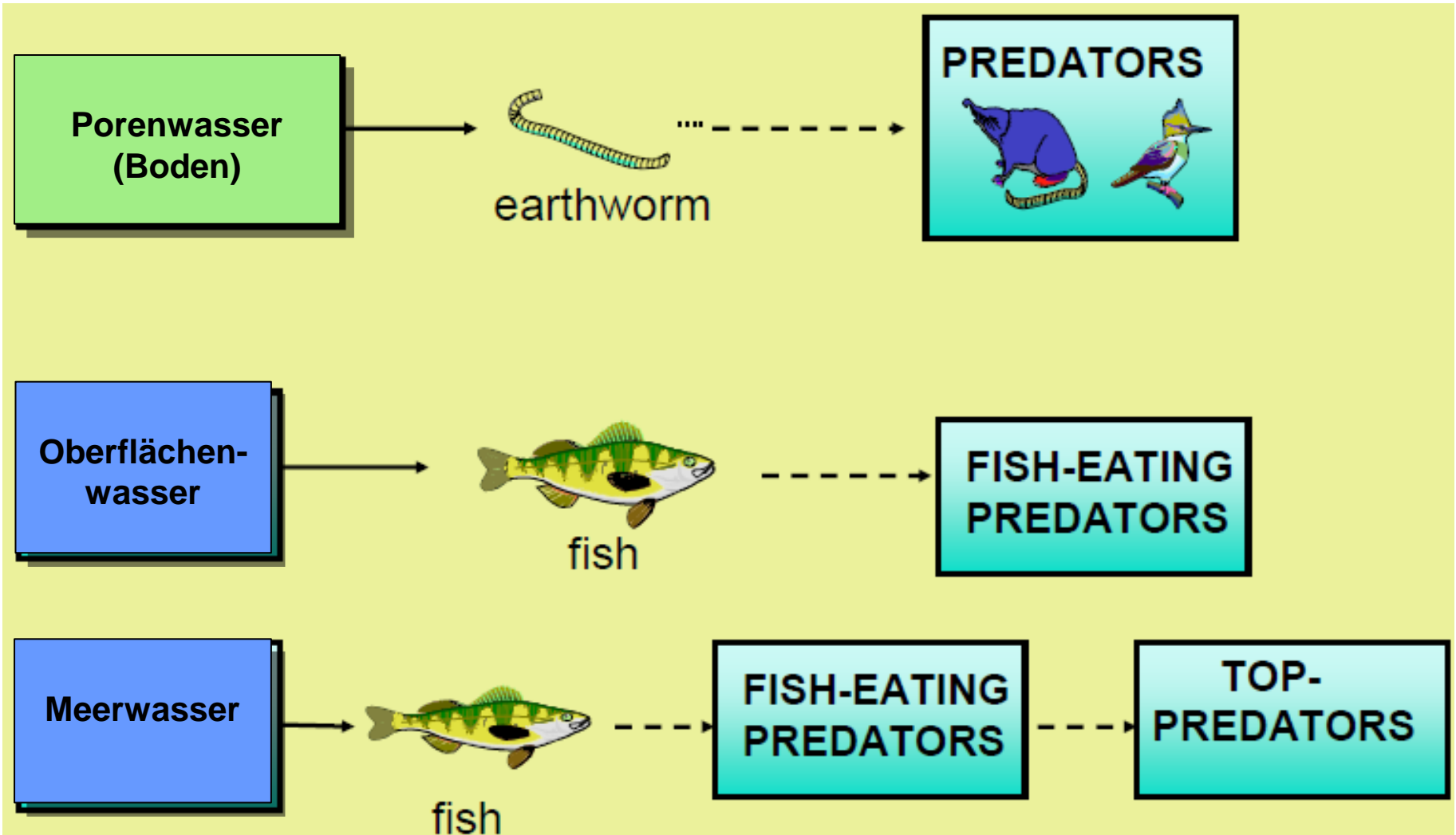
PEC

für die
verschiede-
nen
Umwelt-
Kompartimente

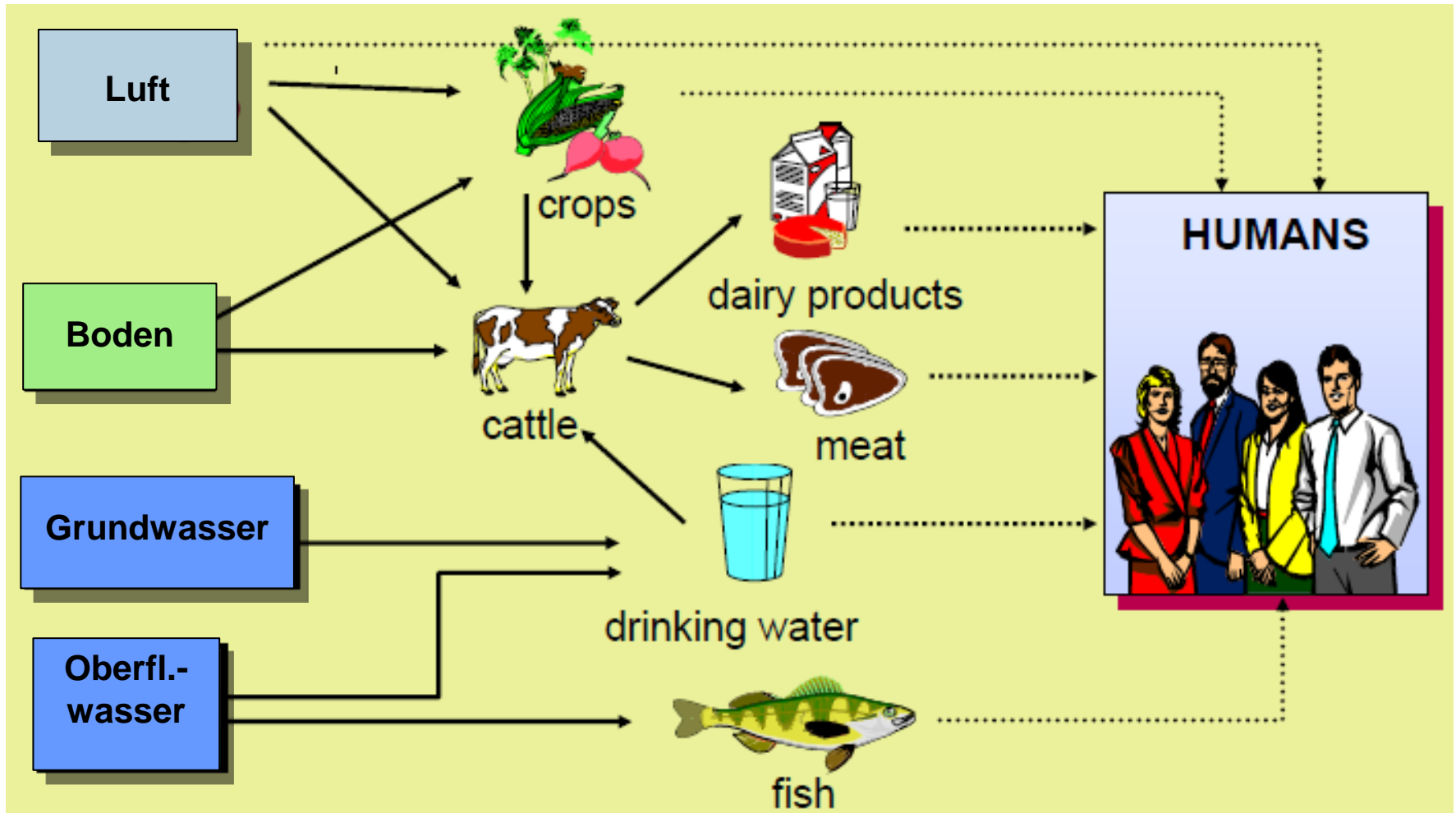


Weit
verbreitete
Anwendung

Anreicherung in der Nahrungskette (Secondary Poisoning)



Indirekte Exposition des Menschen



Lokale Emissionsschätzung

industrial setting



Maximum daily use (t/day)

$$Q_{\text{daily}} = \text{total registrant's tonnage EU level (t/year)} / \text{default number release days (days/year)}$$

Environmental compartments

Man via environment, Top Predator

Maximum annual use (t/year)

$$Q_{\text{annual}} = \text{total registrant's supply volume (t/year)}$$

$$Q_{\text{daily}} = Q_{\text{annual}} / 365 \text{ days}$$

$$E_{\text{local,IU,j}} \text{ (kg/day)} = Q_{\text{daily,IU}} \times RF_{\text{IU,j}} \times 1000$$

RF: release factor,
IU: identified use,
j: environmental compartment



Average daily use over a year (t/365 days)

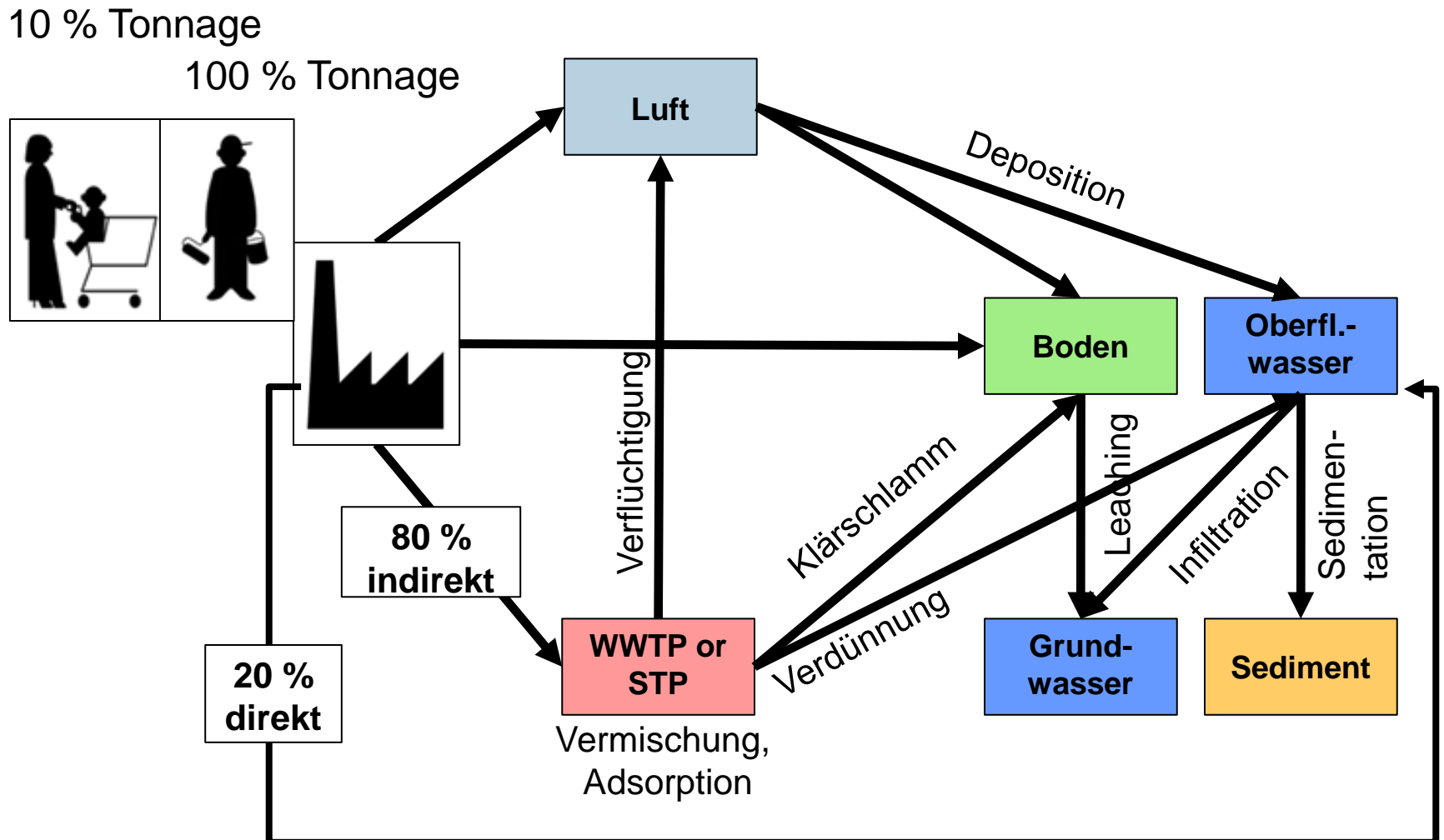
$$Q_{\text{daily}} = (\text{total registrant's tonnage EU level} / (10 * 2000 * 365)) * 4$$

$$= \text{total registrant's tonnage EU level} * (5,5 * 10^{-7})$$

wide dispersive use

Pictures: Source: ereach, Graphics: Hanne Simone; modified

Regionale Expositionsschätzung



Pictures: Source: ereach, Graphics: Hanne Simone; modified

Aufbau des Programms

- Besteht aus vier unabhängigen Bausteinen
 1. Eingabe oder Ermittlung von PNECs
 2. Modul Emissionsschätzung: Ermittlung der lokalen und regionalen Emissionsmengen
 3. Fate-Modul: Ermittlung der Expositionshöhen verschiedener Umweltkompartimente nach Verteilung und Abbau in der Umwelt (PEC_{local} und PEC_{regional})
 4. Ermittlung detaillierter lokaler und regionaler Risikoquotienten für alle Umweltkompartimente

Startbildschirm

The screenshot displays the EUSES 2.1.2 software interface. At the top, the window title bar reads "EUSES 2.1.2 - new". Below this is a menu bar with the following items: File, Edit, Assess, Defaults, System, and Help. A tool bar is located below the menu bar, containing icons and labels for: new, open, save, edit, search, expand, collapse, select, start, print, and help. The main area of the interface is an outline view showing a tree structure under the "Study" folder. The items in the outline are: Study identification, Assessment type, Defaults, Substance, Release estimation, Distribution, Exposure, Effects, and Risk characterization. At the bottom of the interface is a status bar with several fields: "Study" (containing "new"), "Non-substance data" (containing "Standard Euses 2.1"), a row of checkboxes for "I", "II", "III", "IV", "V", "HEM", and "Bio" (with "I", "II", and "III" checked), "Mode" (containing "Interactive"), and "Base set" (containing "Incomplete").

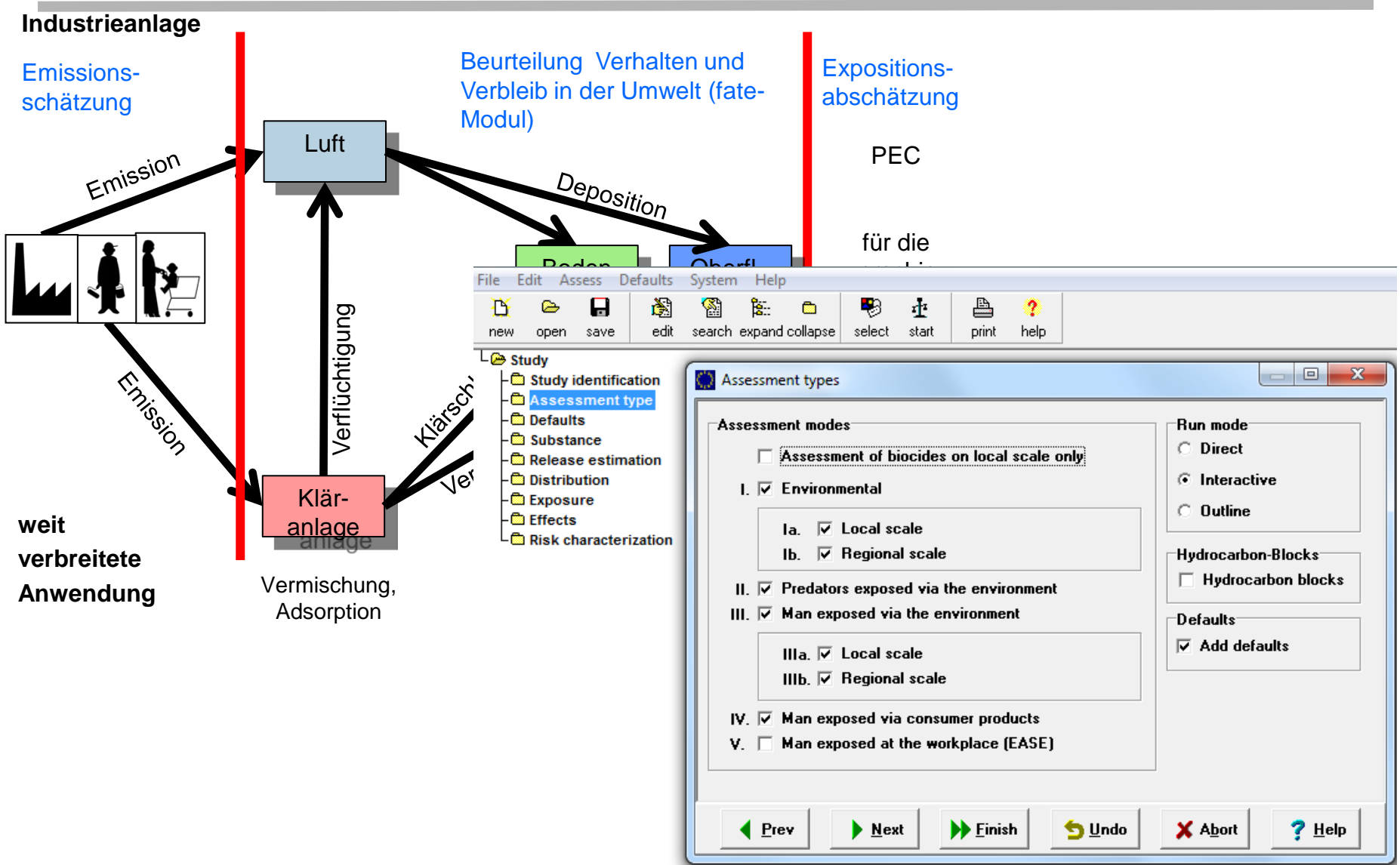
Menu

Tool bar

Outline

Status bar

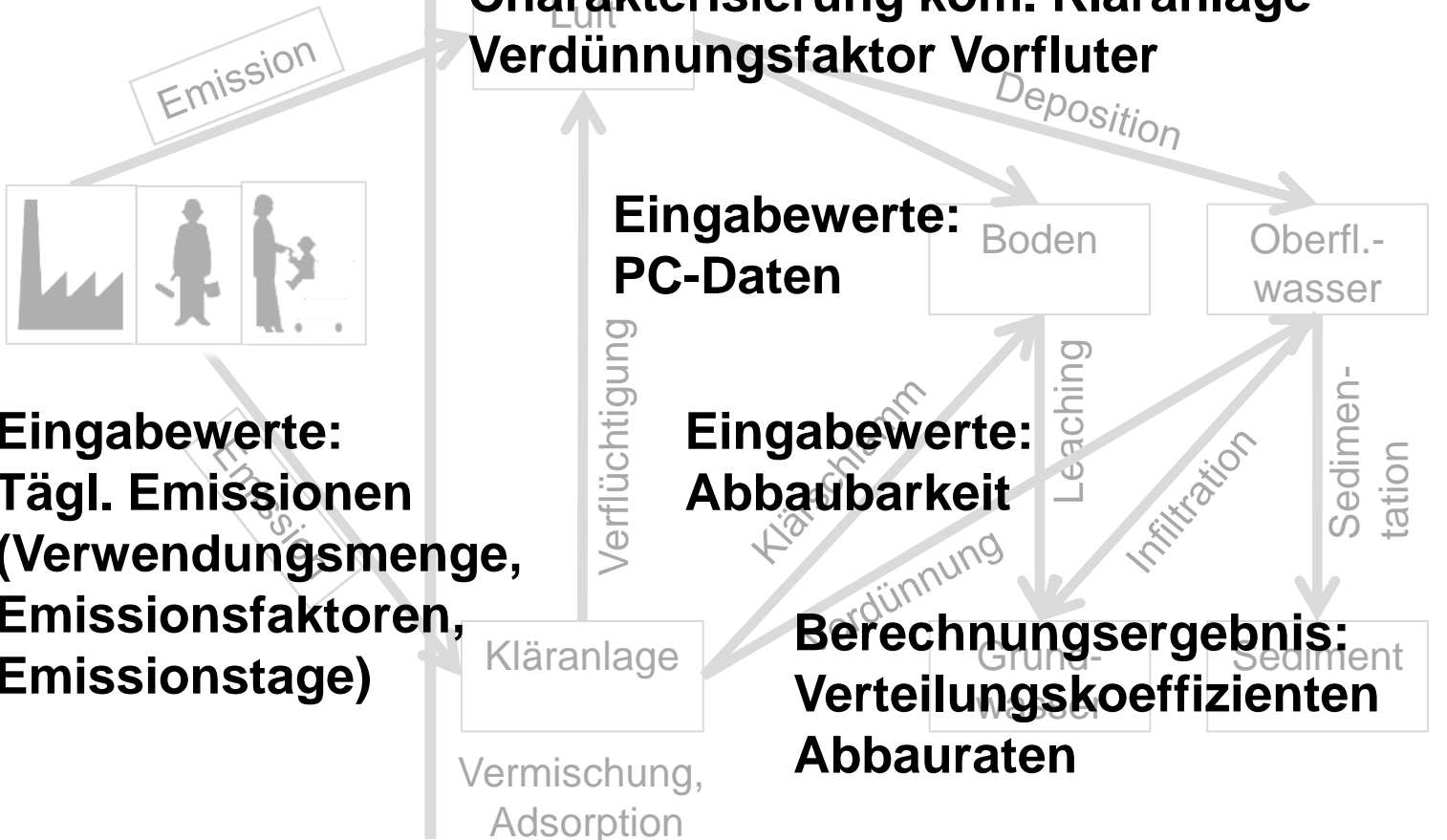
Assistenzfunktion



weit verbreitete Anwendung

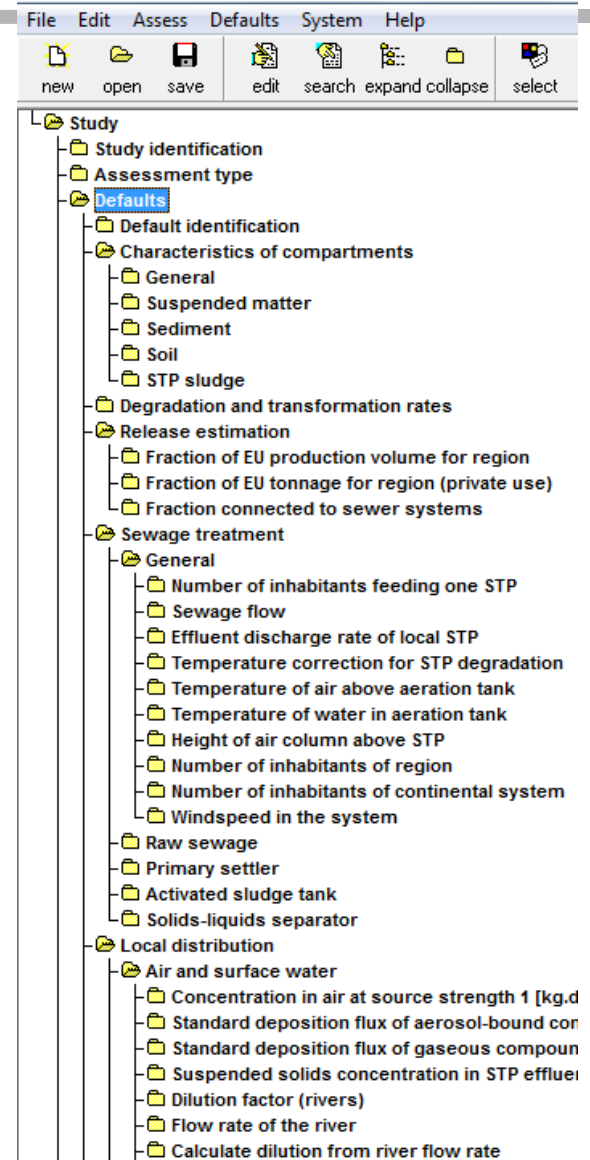
Vermischung, Adsorption

Standardwerte:
 Charakterisierung der Umwelt
 Verteilung Mengen regional / lokal
 Charakterisierung kom. Kläranlage
 Verdünnungsfaktor Vorfluter



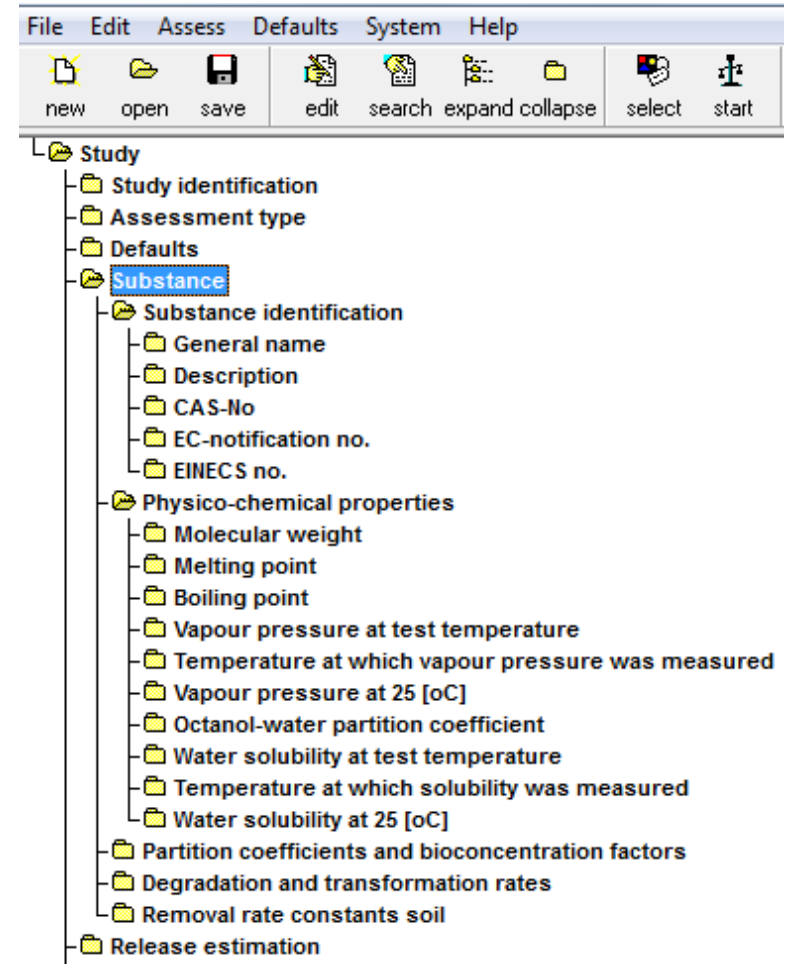
Standardwerte (Defaults)

- Charakterisierung Kompartimente (Oberflächengewässer, Sediment, Boden, Kläranlage)
- Anteil der Tonnage, die in der Region verwendet wird (100 % bzw. 10 % wide dispersive)
- Anschlussgrad an die Kläranlage
- Anzahl Einwohner in lokaler und regionaler Umwelt
- Abwasservolumenstrom in die Kläranlage
- Verdünnungsfaktor im Vorfluter
-



PC-Daten (Substance)

- Molekulargewicht
- Schmelzpunkt
- Dampfdruck
- Oktanol-Wasser Verteilungskoeffizient (Pow)
- Wasserlöslichkeit



👉 Verteilungskoeffizienten werden berechnet

- Feststoff – Wasser
- Luft – Wasser
- Biokonzentrationsfaktoren (für indirekte Exposition über die Umwelt wichtig)
- Biota - Wasser

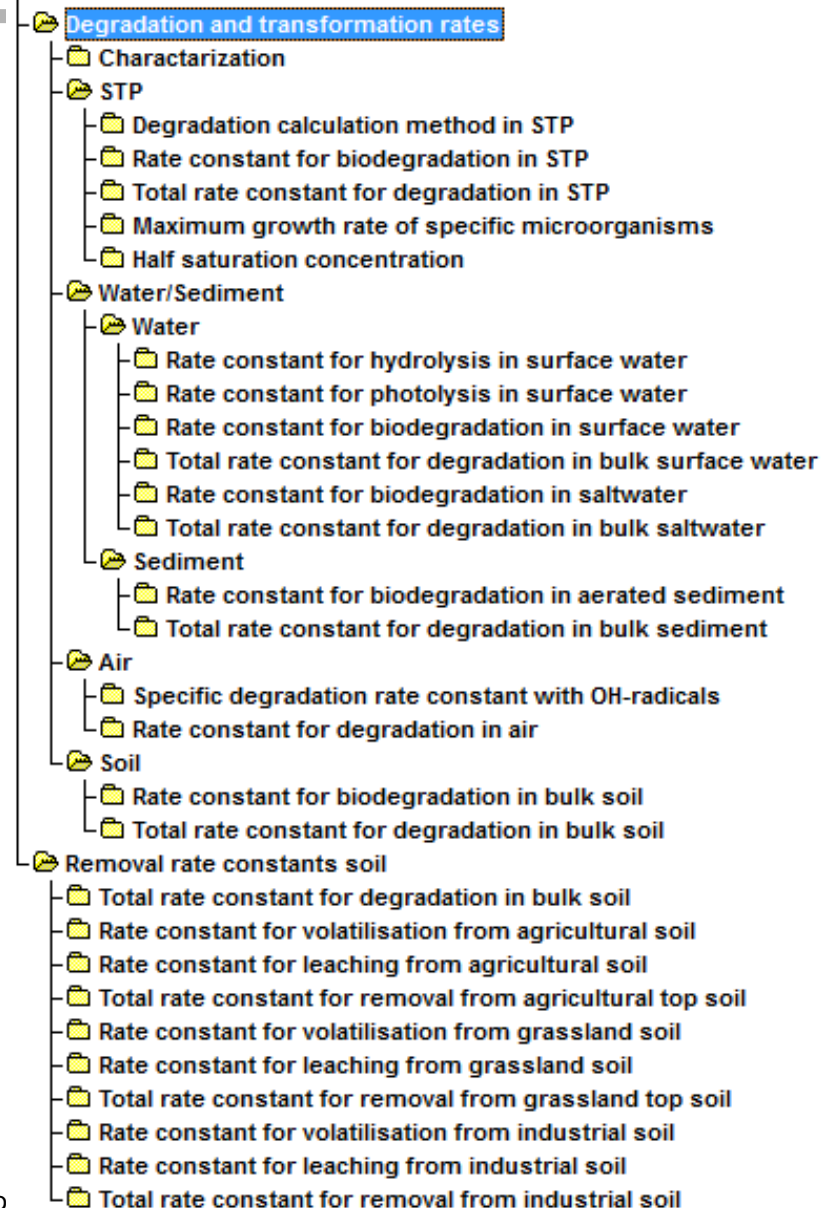
Partition coefficients and bioconcentration factors

Solids-water | Air-water | Bioconcentration factors | Biota-water

| Chemical class for Koc-QSAR | Non-hydrophobics (default QSAR) | |
|---------------------------------------------------------------|---------------------------------|----------|
| Organic carbon-water partition coefficient | 21.5 | [l.kg-1] |
| Solids-water partition coefficient in soil | 0.431 | [l.kg-1] |
| Solids-water partition coefficient in sediment | 1.08 | [l.kg-1] |
| Solids-water partition coefficient suspended matter | 2.15 | [l.kg-1] |
| Solids-water partition coefficient in raw sewage sludge | 6.46 | [l.kg-1] |
| Solids-water partition coefficient in settled sewage sludge | 6.46 | [l.kg-1] |
| Solids-water partition coefficient in activated sewage sludge | 7.97 | [l.kg-1] |
| Solids-water partition coefficient in effluent sewage sludge | 7.97 | [l.kg-1] |
| Soil-water partition coefficient | 11.5 | [m3.m-3] |
| Suspended matter-water partition coefficient | 1.44 | [m3.m-3] |
| Sediment-water partition coefficient | 1.34 | [m3.m-3] |

Abbau- und Umwandlungsraten

- Eingabe:
Charakterisierung
Abbauverhalten
(leicht biolog. abbaubar)
- Berechnung:
Abbauraten
in Kläranlage, Wasser,
Sediment, Luft, Boden



Emissionsschätzung

Industrieanlage

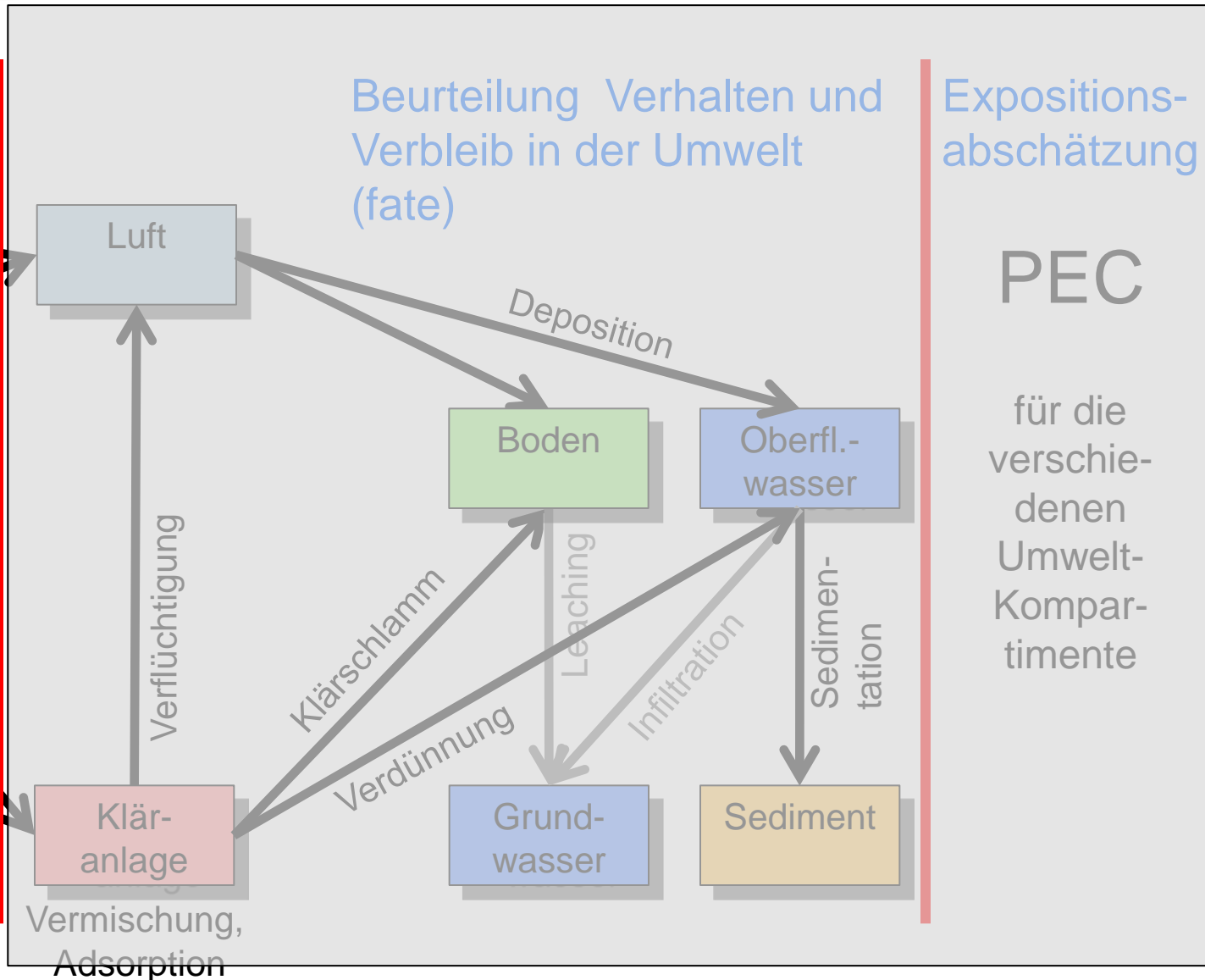
Emissions-
schätzung



Emission

Emission

Weit
verbreitete
Anwendung



Emissionsschätzung Eingabewerte

- Tonnagen
- Emissionsfaktoren
- Emissionstage
- Lebensphase

Use patterns

| Production steps | | | | |
|------------------|------|---------------|-------------|-------------|
| | Frac | [Tonnes.yr-1] | IndCat | UseCat |
| 1 Production | 1 | 45.5 | 15/0 Others | 55/0 Others |
| total | 1 | | | |

| Other life cycle steps | | | | | | | | | |
|------------------------|------|---------------|-------------|-------------|------|-------|------|------|-------|
| Usage | Frac | [Tonnes.yr-1] | IndCat | UseCat | Form | Indus | Priv | Serv | Waste |
| 2 Consumer use in c | 1 | 45.5 | 15/0 Others | 55/0 Others | | | X | | |
| total | 1 | | | | | | | | |

File Edit Assess Defaults System Help

new open save edit search expand collapse select

- Study
 - Study identification
 - Assessment type
 - Defaults
 - Substance
 - Release estimation**
 - Characterization and tonnage
 - High Production Volume Chemical
 - Production volume of chemical in EU
 - Fraction of EU production volume for region
 - Regional production volume of substance
 - Continental production volume of substance
 - Volume of chemical imported to EU
 - Volume of chemical exported from EU
 - Tonnage of substance in Europe
 - Use patterns
 - Production steps
 - Other life cycle steps
 - Intermediate results
 - Regional and continental total emissions
 - Local
 - Distribution
 - Exposure
 - Effects
 - Risk characterization

EUSES Modul Emissionsschätzung geeignet für REACH?

- Emissionsfaktoren beruhen grundsätzlich auf Annahmen über Verwendungsbedingungen und Risikomanagementmaßnahmen
- EUSES: zugrundeliegende Annahmen der Emissionsfaktoren aus den A- und B-Tabellen des EU-TGD sind nicht bekannt
- Nutzung für die Stoffsicherheitsbeurteilung unter REACH ist damit schwierig
- Es ist jedoch möglich die Emissionsabschätzung an die Vorgehensweisen unter REACH anzulehnen.

Hier gibt es zwei Möglichkeiten:

Möglichkeiten der Anpassung Modul Emissionsschätzung an REACH

1. Anstelle der EUSES Standard-Abschätzung können die Emissionsfaktoren aus den ERC manuell eingegeben werden oder
2. Die Gesamtemissionen pro Verwendung können mit Hilfe der in REACH Leitlinie Kapitel R.16 vorgegebenen Gleichungen berechnet und manuell in EUSES eingegeben werden

1. Manuelle Eingabe der Emissionsfaktoren gem. REACH

Emission input data (production step)

Usage/production title: Production

Industry category: 15/0 Others

Use category: 55/0 Others

File Edit Assess Defaults System Help

new open save edit search expand collapse

Study

- Study identification
- Assessment type
- Defaults
- Substance
- Release estimation
 - Characterization and tonnage
 - Use patterns
 - Production steps
 - Other life cycle steps
 - Intermediate results
 - Intermediate [1 "Production"]
 - Release fractions and emission days [1 "Production"]
 - Regional and continental releases [1 "Production"]
 - Intermediate [2 "Consumer use in coating"]
 - Regional and continental total emissions
 - Local
- Distribution
- Exposure
- Effects
- Risk characterization

Release fractions and emission days [1 "Production", IC=15/UC=55]

Production **Emissionsfaktor aus ERC, spERC**

Emission tables: A1.1 (general table), B1.2 (specific uses)

Release fractions

| | | | |
|---------------------------------------------------|-------|-----|---|
| Fraction of tonnage released to air | 0.05 | [-] | o |
| Fraction of tonnage released to wastewater | 0.02 | [-] | o |
| Fraction of tonnage released to surface water | 0 | [-] | o |
| Fraction of tonnage released to industrial soil | 1E-04 | [-] | o |
| Fraction of tonnage released to agricultural soil | 0 | [-] | o |
| Emission fractions determined by special scenario | No | | o |

Emission days

| | | | |
|----------------------------------------------|-----|-----|---|
| Fraction of the main local source | 0.9 | [-] | o |
| Number of emission days per year | 41 | [-] | o |
| Release to wastewater only | No | | d |
| Emission days determined by special scenario | No | | o |

Prev Next Finish Undo Abort Help

Höchste lokal verwendete Menge

Emissionstage

2. Manuelle Eingabe der Gesamtemissionen pro Verwendung

| Usage | Step | Emis. Air | Emis. Water | Biocides | Show | Intermittent |
|------------------------------|--------|---------------|---------------|----------|------|--------------|
| 1 "Production" (15/55) | 1 Prod | 49.9 [kg.d-1] | 20 [kg.d-1] | No | Yes | |
| 2 "Consumer use in coatings" | 4 Priv | 0 [kg.d-1] | 1.25 [kg.d-1] | No | Yes | |

**Lokale Emissionen
je Verwendung
und Kompartiment
(E_{local})**

File Edit Assess Defaults System Help

new open save edit search expand collapse select star

- Study
 - Study identification
 - Assessment type
 - Defaults
 - Substance
 - Release estimation
 - Characterization and tonnage
 - Use patterns
 - Intermediate results
 - Regional and continental total emissions
 - Local**
 - [1 "Production"] [Production]
 - Local emission to air during episode
 - Emission to air calculated by special scenario
 - Local emission to wastewater during episode
 - Emission to water calculated by special scenario
 - Show this step in further calculations
 - Intermittent release
 - [2 "Consumer use in coatings"] [Private use]
 - Distribution
 - Exposure
 - Effects
 - Risk characterization

Berechnung PEC_{local} Oberflächenwasser

erforderliche Daten / Informationen

Verwendungsbedingungen (Dauer, Häufigkeit, Konzentration, eingesetzte Verfahren), Risikomanagementmaßnahmen

Emissionsfaktoren, z. B. ERC oder spERC

Volumenstrom in die Kläranlage

F_{stp} = Fraktion des Stoffes der im Abwasser bleibt
P/C-Daten (Wasserlöslichkeit, Dampfdruck, ..),
Verteilungskoeffizienten, Abbaudaten

Dilution = (Volumen KA + Volumen Vorfluter) / Volumen KA
KA = Kläranlage

Prozess

z.B. Stoffherstellg.

Emissionen aus Verwendung

$E_{local\ water}$

Einträge in das Abwasser

$C_{local\ influent}$

Elimination in einer Kläranlage

$C_{local\ effluent}$

Verteilung im Vorfluter

$C_{local\ water}$

PEC_{local}

Formel

$$E_{local\ water} = Q_{daily} \times RF$$

$$= (Prod.menge/Emissionstage) \times RF$$

RF = Emissionsfaktor

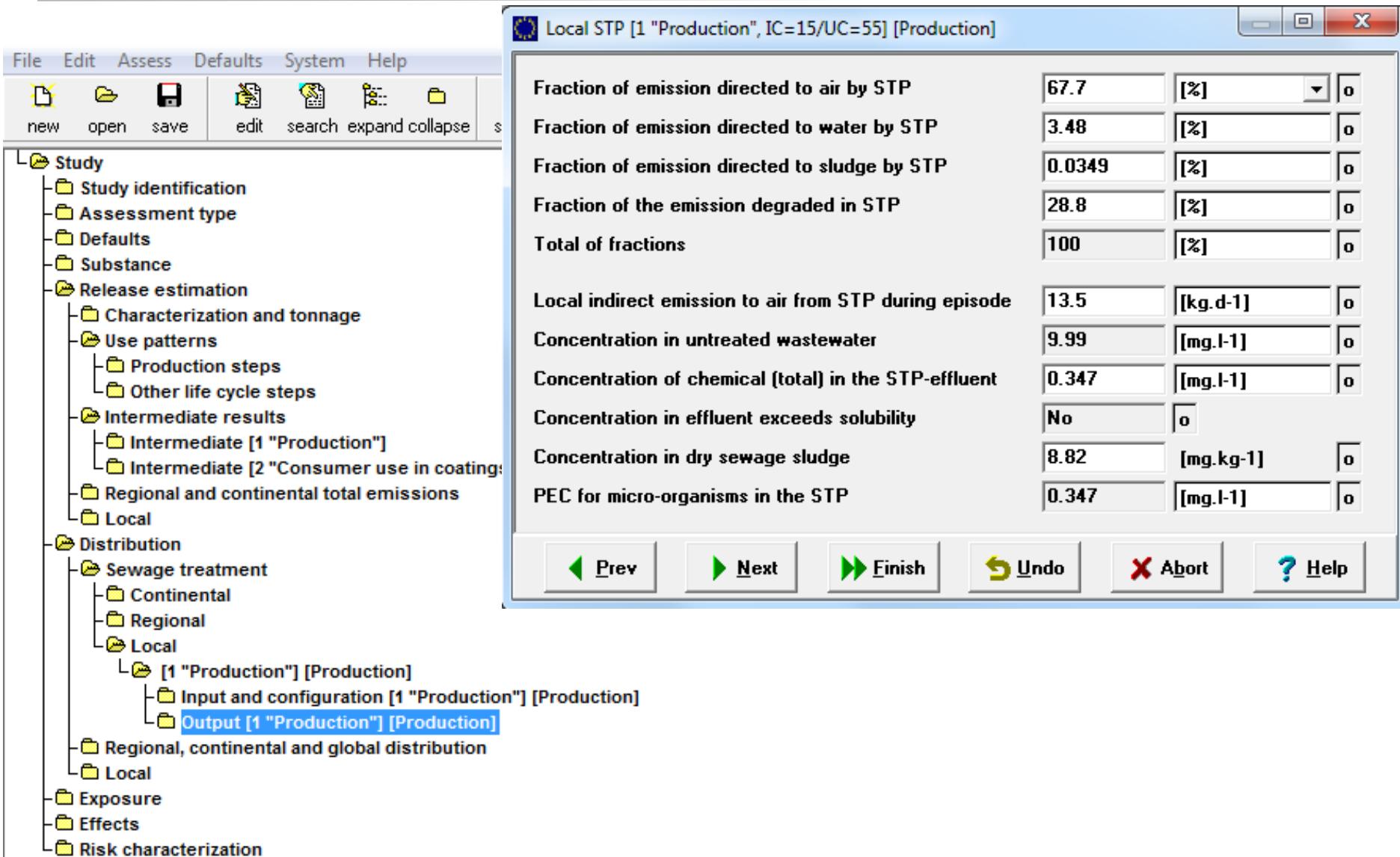
$$C_{local\ influent} = E_{local\ water} / Vol.strom\ in\ die\ Kläranl.$$

$$C_{local\ effluent} = C_{local\ influent} \times F_{stp}$$

$$C_{local\ water} = C_{local\ effluent} / Dilution$$

$$PEC_{local} = C_{local\ water} + PEC_{regional}$$

Verteilung in der Kläranlage



File Edit Assess Defaults System Help

new open save edit search expand collapse

Study

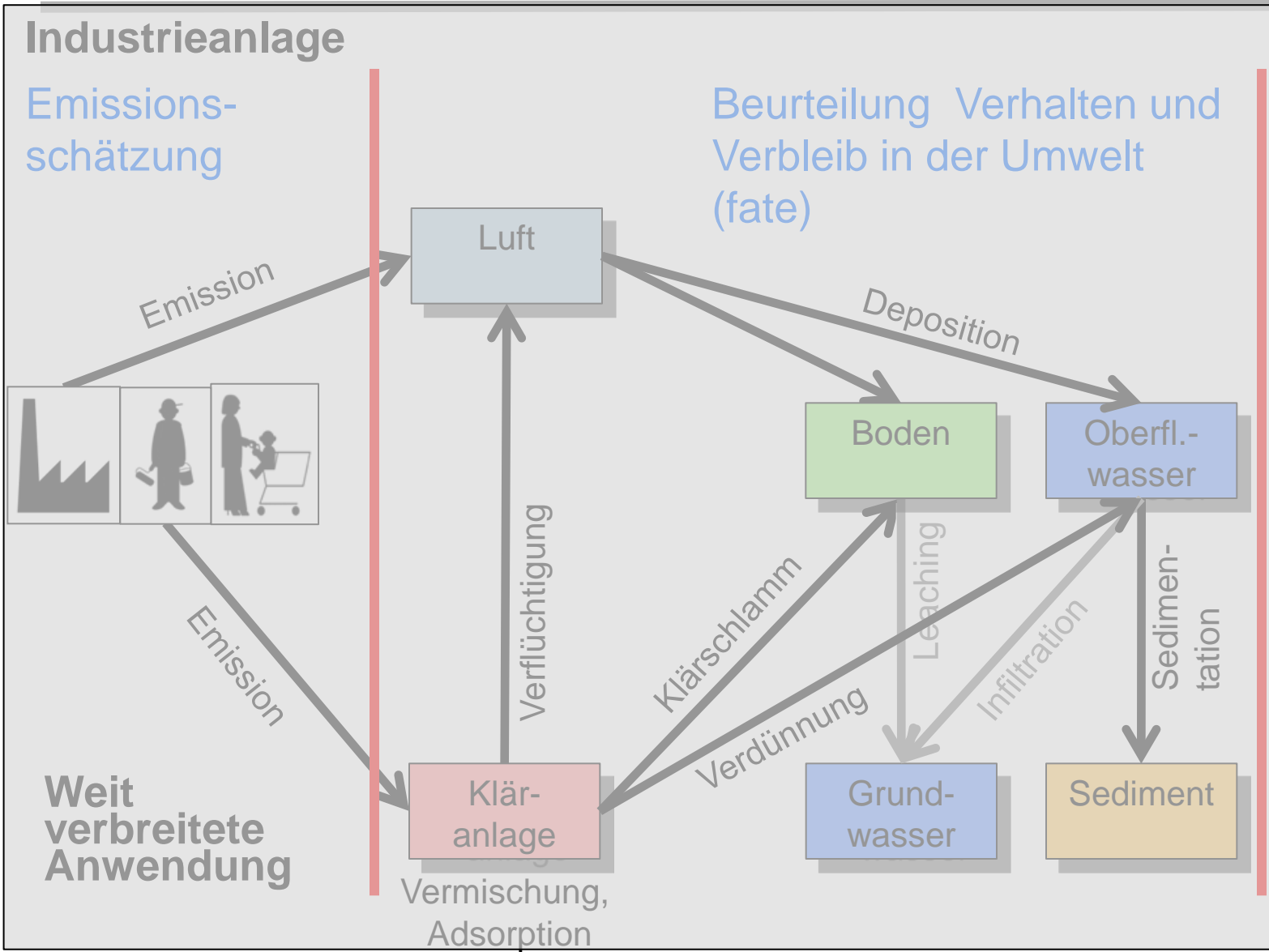
- Study identification
- Assessment type
- Defaults
- Substance
- Release estimation
 - Characterization and tonnage
 - Use patterns
 - Production steps
 - Other life cycle steps
 - Intermediate results
 - Intermediate [1 "Production"]
 - Intermediate [2 "Consumer use in coating"]
 - Regional and continental total emissions
 - Local
- Distribution
 - Sewage treatment
 - Continental
 - Regional
 - Local
 - [1 "Production"] [Production]
 - Input and configuration [1 "Production"] [Production]
 - Output [1 "Production"] [Production]
 - Regional, continental and global distribution
 - Local
- Exposure
- Effects
- Risk characterization

Local STP [1 "Production", IC=15/UC=55] [Production]

| | | | |
|--------------------------------------------------------|--------|-----------|---|
| Fraction of emission directed to air by STP | 67.7 | [%] | o |
| Fraction of emission directed to water by STP | 3.48 | [%] | o |
| Fraction of emission directed to sludge by STP | 0.0349 | [%] | o |
| Fraction of the emission degraded in STP | 28.8 | [%] | o |
| Total of fractions | 100 | [%] | o |
| Local indirect emission to air from STP during episode | 13.5 | [kg.d-1] | o |
| Concentration in untreated wastewater | 9.99 | [mg.l-1] | o |
| Concentration of chemical (total) in the STP-effluent | 0.347 | [mg.l-1] | o |
| Concentration in effluent exceeds solubility | No | o | |
| Concentration in dry sewage sludge | 8.82 | [mg.kg-1] | o |
| PEC for micro-organisms in the STP | 0.347 | [mg.l-1] | o |

◀ Prev ▶ Next ▶▶ Finish ↶ Undo ✖ Abort ? Help

Expositionsschätzung



Expositions-
abschätzung

PEC

für die
verschie-
denen
Umwelt-
Kompar-
timente

Ergebnis der Berechnungen mit EUSES

- Geschätzte Umweltkonzentrationen (PEC-Werte) für die verschiedenen Umweltkompartimente
 - Zur Risikocharakterisierung Umweltkompartimente
 - Zur Berechnung Indirekte Exposition (man via environment, secondary poisoning)

Local PECs

| | | Air | Fresh water | Fresh water | Fresh water | Marine | Marine | Marine | Agric.soil |
|--------------------------|--------|-------------|--------------|-------------|--------------|--------------|-------------|--------------|--------------|
| | | Annual avg. | Emis. period | Annual avg. | Sediment | Emis. period | Annual avg. | Sediment | 30 [d] |
| Usage | Step | [mg.m-3] | [mg.l-1] | [mg.l-1] | [mg.kgwwt-1] | [mg.l-1] | [mg.l-1] | [mg.kgwwt-1] | [mg.kgwwt-1] |
| 1 "Production" (15/55) | 1 Prod | 0.0156 | 0.0347 | 3.9E-03 | 0.0301 | 0.0999 | 0.0112 | 0.0866 | 8.31E-04 |
| 2 "Consumer use in coal" | 4 Priv | 2.35E-04 | 2.17E-03 | 2.17E-03 | 1.88E-03 | 6.23E-03 | 6.23E-03 | 5.4E-03 | 5.25E-05 |

Buttons: Edit, Prev, Next, Finish, Abort, Help

Ergebnis der Berechnungen mit EUSES

- EUSES erstellt automatisch einen elektronischen Bericht, der neben den Ergebnissen auch alle Eingabeparameter auflistet
- Dies umfasst explizit NICHT die Verwendungsbedingungen und Risikomanagementmaßnahmen
- Alle Eingabewerte und Vorgabewerte für die Expositionsabschätzung insbesondere die Abweichungen von den Standardangaben dokumentieren

Weitere Informationen

- EUSES (Version 2.1.2) sowie das zugehörige Handbuch zum Programm können kostenlos im Internet von der Website

http://ihcp.jrc.ec.europa.eu/our_activities/public-

[health/risk_assessment_of_Biocides/euses](http://ihcp.jrc.ec.europa.eu/our_activities/public-health/risk_assessment_of_Biocides/euses)

heruntergeladen und auf dem eigenen Rechner installiert werden.

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit



Backup Folien

Regional release estimation

- Regional releases are used as background concentration for the local environment
- Sum of emission from all sources in the region

Average daily use at regional scale for each use (t/day)

| | | |
|-----------------------------------------|---|-------------------------------------------------|
| $Q_{\text{regional daily, IU}}$ (t/day) | = | Regional tonnage for each use/ 365 days |
| Regional tonnage (t/year) | = | 100 % tonnage at EU level (industrial setting) |
| | = | 10 % tonnage at EU level (wide dispersive uses) |

$$E_{\text{regional, IU, j}} \text{ (kg/day)} = Q_{\text{regional daily, IU}} \times RF_{\text{IU, j}} \times 1000$$

RF: release factor,
IU: identified use,
j: environmental
compartment

Änderungen gegenüber älteren Version

The model changes in Euses “2.1.2” (as compared to version 2.1.1) are primarily:

- Possibility for input of a measured Henry’s law coefficient (parameter HenryTemp), for a specific temperature (parameter TempHenry). see blacklist item #821. When no measured Henry is entered, calculations are the same as in Euses 2.1.1.
- Separate local scale PNECs for sediment (fresh and marine), based on 10 % organic carbon (FocSusp), instead of 5 % (FocSed)
- Updates for several biocides scenario’s (PT7, PT9, PT11, PT12, PT18, PT22)