

Toward green chemistry: integrating life cycle with environmental risk assessment of chemicals

Yiping XU^{1*}, Zijian WANG²

1. Key Laboratory of Drinking Water Science and Technology, Research Center for Eco-Environmental Sciences, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100085, China
2. State Key Laboratory of Environmental Aquatic Chemistry, Research Center for Eco-Environmental Sciences, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100085, China

Abstract: The principles of green chemistry and the precautionary principle encourage manufacturers and regulators to minimize the generation and use of toxic substances and seek safer alternatives. Environmental risk assessment (ERA) and life cycle assessment (LCA) are considered as major analytic approaches used to support chemical sustainable management and decisions. ERA focuses on predicting the likelihood of a certain effect when dealing with hazard chemicals, by comparing the predicted total exposure of certain receptors to hazard chemicals with corresponding thresholds. LCA is typically invoked to achieve sustainability in green design by comparing the environmental performance of different chemical products, or different life cycle phases of the product. Both ERA and LCA have their specific concept framework and methodology respectively, consequently can supply decision makers with different types of information. However, each method alone has certain limitation during actual application. Integrated framework of two methods can fill the gaps and make strong support for chemical sustainable management. Therefore, different integration approaches, which claimed integration, combination, complementary or hybridization (trade-off) use of ERA and LCA are summarized in the present review. Several scientific issues and challenges on integration framework of ERA and LCA are discussed, i.e. data gap, spatial and temporal characteristics, use of toxicity data and combined effect, as well as coupling model issues and uncertainty. Finally some perspectives are presented on the application of LCA-ERA integrated methods in green chemistry. Communication of risk and hazard information of chemicals is vitally important in promoting hazard chemical reduction and replacement. Therefore the integrated approaches are suggested to identify safer alternatives to a chemical by utilizing an environmental risk assessment over the entire life cycle.

Key learning points:

- (1) Environmental risk assessment (ERA) and life cycle assessment (LCA) are two major analytical tools used to support decision making in chemical management, providing different types of information.
- (2) Different integration approaches of ERA and LCA are summarized, including integration, combination, complementary or hybridization (trade-off) use of ERA and LCA.
- (3) Communication of risk and hazard information of chemicals is vitally important in promoting hazard chemical reduction and replacement for safer alternatives.

Key words: chemical; environmental risk assessment; life cycle assessment; green chemistry; chemical footprint

收稿: 2018-04-10, 修回: 2018-09-08, 网络发表: 2018-10-19, Received: 2018-04-10, Revised: 2018-09-08, Published online: 2018-10-19
基金项目: 国家自然科学基金资助项目(编号: 21437006); 中国科学院重点部署项目(编号: ZDRW-ZS-2017-3-5)
作者简介: 许宜平(1979-), 女, 江苏省南京市人, 博士, 副研究员, 主要从事环境暴露与水生态毒理学研究, E-mail: ypxu@rcees.ac.cn.

引用格式: 许宜平, 王子健. 面向绿色化学: 融合生命周期的化学品环境风险评价. 过程工程学报, 2018, 18(增刊 1): 43-51.
Xu Y P, Wang Z J. Toward green chemistry: integrating life cycle with environmental risk assessment of chemicals (in Chinese).
Chin. J. Process Eng., 2018, 18(S1): 43-51, DOI: 10.12034/j.issn.1009-606X.20180152.

面向绿色化学：融合生命周期的化学品环境风险评价

许宜平^{1*}, 王子健²

1. 中国科学院生态环境研究中心中国科学院饮用水科学与技术重点实验室, 北京 100085

2. 中国科学院生态环境研究中心环境水质学国家重点实验室, 北京 100085

摘要: 绿色化学依据“预防性原则”, 主要研究如何在化工生产过程中减少有毒有害物质的产生和使用, 寻求更安全的替代品。作为化学品可持续管理的重要分析方法工具, 环境风险评价(ERA)和生命周期评价(LCA)具有各自的理论框架和方法体系, 但在实际应用中可能都存在一定的局限性。将二者融合的评价方法框架可弥补各自缺陷从而更好地为面向可持续发展的化学品管理提供支撑。本工作概述了 ERA 和 LCA 不同融合方式(整合、联合、互补和权衡)及融合评价方法研究面临的主要问题与挑战, 展望了面向绿色化学的应用, 以期筛选评价更安全的替代化学品与替代技术、支撑化学品可持续管理提供理论依据与方法框架。

要点:

(1) 环境风险评价(ERA)和生命周期评价(LCA)是化学品可持续管理的重要分析工具, 为管理决策提供不同类型信息。

(2) ERA 与 LCA 融合的评价方法框架有四种方式—整合、联合、互补和权衡。

(3) ERA 与 LCA 融合的评价方法能为筛选更安全的替代化学品(技术)提供全生命周期的化学品危害性与风险信息。

关键词: 化学品; 环境风险评价; 生命周期评价; 绿色化学; 化学品足迹

中图分类号: TQ086/X820.4

文献标识码: A

文章编号: 1009-606X(2018)S1-0043-09

1 前言

化学工业是国民经济的重要支柱产业, 为几乎所有现代生产和制造提供了基础。从合成纺织品和聚合物到半导体制造到集约化农业, 各种化学品与人民的衣食住行息息相关, 可提高和改善人们的生活质量, 促进可持续生产和消费。合成化学物质不仅遍及工业世界, 而且排放分散在自然界中。部分化学品对人类或环境有危险性, 对人类和动植物健康有害, 被认为是有毒(Toxic, T)化学品。除了急性和直接的伤害外, 还可能包括致癌、致突变、生殖毒性、发育毒性和内分泌干扰效应等。一些化学物质具有持久性(Persistent, P), 长期存在于环境中。如果不能通过代谢途径将其分解或从体内排出, 会产生生物累积(Bioaccumulation, B)。这些具有 PBT 性质的有害化学物质通过生物累积被低级生物吸收, 进一步沿食物链传递直到被顶级掠食者(如人类)摄食, 带来更严重威胁。由于 PBT 化学物质易通过大气、水和土壤进行传输, 影响范围涉及很远的地理学范畴或生物世代, 而引起世界各国广泛关注^[1]。

绿色化学是近年来化学品替代技术热门研究领域。绿色化学依据预防性原则, 主要研究如何在化工生产过程中减少有毒有害物质的产生和使用, 寻求更安全的替代品。绿色化学提倡通过减少有害化学原料/助剂的使用, 提高物质原料循环和能源效率, 改进工艺、减少有害副产物和废弃物排放及研制环境友好替代品等技术手段, 替代传统的污染和危险废弃物末端治理

技术, 从而达到削减环境污染、保护人类健康、节约工业成本的目标, 鼓励更加绿色的合成技术路线, 例如通过改进反应路线减少副产物、使用生物催化剂和微生物等手段^[2,3]。首先需要评价那些危害性质未知的化学品及其被开发替代产品的安全性, 了解产品有毒物质的信息。这些有毒化学物质随生产使用过程流动, 且通过环境介质(大气、水和土壤)进行传输。用生命周期视角(Life Cycle Aware)关注从化学制造到产品处置全过程, 评价从局部风险到区域安全乃至全球影响, 才能更好地实现化学品的可持续管理^[4]。

环境风险评价(Environmental Risk Assessment, ERA)和生命周期评价(Life Cycle Assessment, LCA)是两种用于支持化学品可持续管理的重要分析方法工具。当人或有机体接触到一种有害的化学物质时, 其有可能产生不利影响, 被认为来自于这种化学物质的固有属性, 即危害特性。风险是危害特性的严重性和可能暴露程度的函数。环境风险评价(ERA)是对某一特定暴露场景下发生不良反应的可能性进行定量评价的过程^[5], 如风险超过可接受范围需进行风险管理。生命周期评价(LCA)是基于功能单位对产品、过程或活动等全生命周期潜在环境影响进行定量评价的工具, 不局限于化学品本身, 而是对人类活动可能造成环境影响的综合量化评价^[6]。

许多情况下化学品的风险信息(包括危害特性数据和暴露数据)很难获取, 特别是低产量的化学品, 其公开信息也没有提供信息的监管要求。实现科学合理的

ERA 需要高技术和高成本支持, 因为有大量的实验室测试数据和经验预测数据, 并且受不确定性和程度制约。基于经验研究的 ERA 也存在很多困惑和技术难点, 比如如何界定容许或合理水平通常依赖于价值判断。对于非线性剂量反应, 现有的技术手段可能并不能合理解释某些毒性作用模式, 例如慢性低水平暴露或多重胁迫因子的协同效应。对风险的高度关注可能带来问题或资源的转移, 如局部(Local)风险问题和区域(Regional)影响问题的矛盾, 被转移的资源可以用于调查更安全的替代设计或用于其它风险缓解措施^[5]。人们呼吁建立一种更全面的化学品安全评价模式, 该模式考虑到更广泛的威胁, 较少依赖环境损害的定量模型, 需要一个更完整的框架来了解和监测化学品对公众健康和生态的系统性风险。化学品安全评价不仅应该对危害、剂量反应和暴露进行评价, 以确定具体的风险是否合理, 还应以绿色化学原则为补充, 重点关注化学品的内在特性、用途及其制造的生命周期过程, 以避免不必要的风险。虽然风险对于确定化学品暴露的不安全水平至关重要, 但实施过程中遇到的实际困难和大量的不确定性表明, 单独的风险评价不足以管理防范化学品的有害影响。

绿色化学鼓励更加绿色的合成技术路线, 改进反应路线减少有毒副产物产出; 鼓励更加绿色的化学品设计, 开发比既有产品毒性更低、安全性更好的化合物及可降解/可循环利用的化合物。针对绿色化学提倡过程单元和产品流通的全生命周期安全设计, 越来越多的研究提出将生命周期视角与环境风险评价融合的

方法手段和评价框架体系。本工作针对 ERA 和 LCA 这两种化学品可持续管理与安全评价的重要分析工具手段, 从两种评价方法框架的比较、不同方式的融合方法体系及其研究进展、融合评价方法研究中的主要问题与挑战和面向绿色化学的应用展望等方面予以综述, 以期筛选评价更安全的替代化学品与替代技术、支撑化学品可持续管理提供理论依据与技术方法。

2 两种评价方法的框架比较

ERA 和 LCA 最初是由独立的专家小组开发和使用的。ERA 经常关注评价化学物质等胁迫因子对人类和生态系统等风险受体造成的风险。风险通常被定义为一种行为的概率和严重性(性质和程度)的组合。化学品环境风险评价根据风险受体不同, 可以分为生态风险评价(EcoRA, 即狭义的环境风险评价)、人体健康风险评价(HHRA)或综合考虑人类与生态健康的综合风险评价(IRA)。LCA 是对产品或服务进行环境评价的分析方法, 通常涵盖产品或服务的整个生命周期或供应链^[7]。在整个生命周期内, 基于功能单位对环境相关的资源消耗和排放定量评价, 并且评估对环境保护对象(例如人类健康、自然环境和自然资源)的潜在影响。LCA 方法自 20 世纪 70 年代末出现以来, 已经有了很大的发展, 有 4 个生命周期清单(LCI)数据库和生命周期影响评价(LCIA)方法。LCIA 方法涵盖了不断扩大的影响类别和相应的表征模型, 用于将产品或服务的生命周期转化为环境影响^[8,9]。

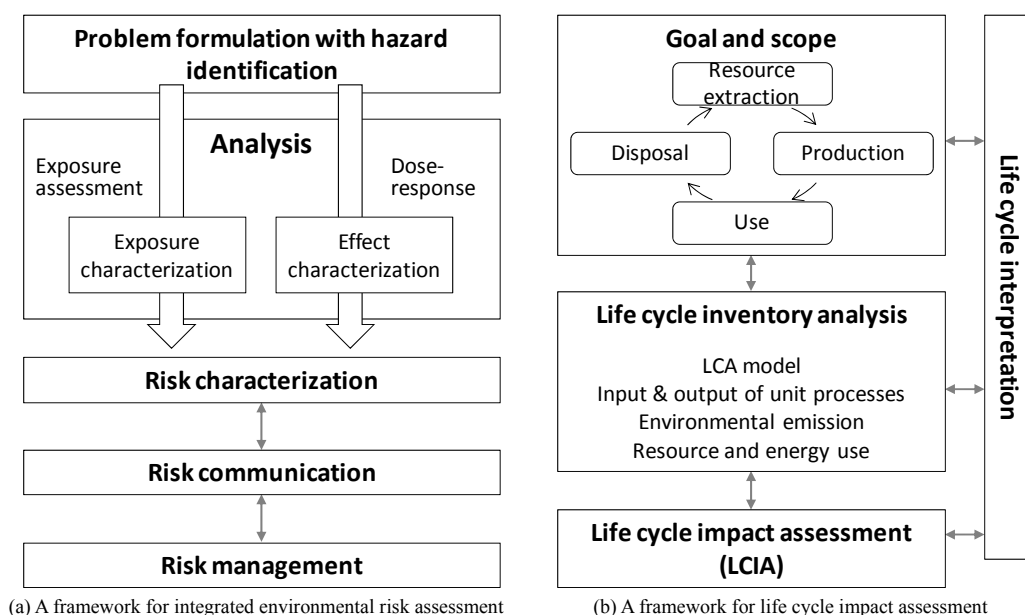


图 1 两种化学品评价方法框架

Fig.1 Frameworks for two chemical assessment approaches

ERA 和 LCA 都可用来评价化学物质对人类和生态环境的影响, 两种评价方法框架见图 1, 具体比较见表 1. 在这两种分析方法工具中, 评价都需要化学物质的环境排放、环境归趋和迁移转化的信息, 不同受体的暴露以及对不同受体的影响. ERA 和 LCA 的基本要素, 包括作为胁迫因子和产品成分的化学物质、作为风险受体或者保护对象的人类健康等. ERA 和 LCA 所评价每种影响的数学关系, 例如剂量反应关系和因果链关系及这些关系中所需要的化学数据和环境数据是相似的. ERA 着重于将受体对胁迫因子的总暴露与相应的效应阈值进行比较, 或预测某一效应的可能性, 即基于合理假设的最恶劣情况的方案. 根据其目的, ERA 包括一个或多个胁迫因子(例如化学物质及混合物)对一

种或几种风险受体(例如人类或特定的其它生态受体). ERA 对某一特定活动可能包含多个胁迫因子和一个或几个受体, 但不考虑这些胁迫因子的排放和对其它地方的这些受体的影响. LCA 通常比较在平均条件(在稳定状态下的常规操作)下不同产品或服务系统的环境性能, 以及产品或服务系统的不同生命周期阶段的环境性能. 传统的 LCA 不考虑胁迫因子的时间-空间动态分布, 不涉及毒性阈值或不同层次可接受性的影响. ERA 的评价目标通常是根据事实结果判断风险是否可以接受, 是否需要风险管理的行为. LCA 则原则上评价产品或服务在整个生命周期的排放造成的影响, 比较实现类似功能的不同替代产品或服务的环境影响. 因此 ERA 和 LCA 可以为决策者提供不同类型的信息.

表 1 化学品环境风险评价和生命周期评价方法框架比较
Table 1 Comparison between method framework of ERA and LCA for chemicals

Chemical assessment framework	Environmental risk assessment (ERA)	Life cycle assessment (LCA)
Basic concept	A measure of the likelihood of the hazard actually causing harm and a measure of the severity of harm in terms of the consequences to people or ecological systems	Compilation and evaluation of the inputs, outputs, and potential environmental impacts of a product system throughout its life cycle
Assessment goal	To predict the probability of a certain effect, to determine acceptability of risk	To compare the environmental performance of different product or service systems, or different life cycle phases of a product or service system
Assessment elements	Stressor, receptor, hazard, exposure, dose-effect relationship	Product/ service, function unit, process flow, impact category, cause-effect chain
Assessment phases	Problem formulation (hazard identification) → dose-response assessment → exposure assessment → risk characterization	Description of the goal and scope → Life cycle inventory analysis → Life cycle impact assessment → Interpretation
Classification of assessment	Ecological risk assessment / human health risk assessment / integrated risk assessment	Life cycle inventory analysis / Life cycle impact assessment
Tiers of assessment	Multiple level risk assessment: qualitative/quantitative risk assessment, deterministic/probability/tiered risk assessment	Multiple environmental impact categories
Spatial characteristics	Occurring under a specific exposure scenario; Disregard emission of chemical stressors elsewhere, mostly local or site-specific	Routine operations under steady-state conditions; Large spatial scale, mostly regional or state or global
Spatial and temporal distribution	Encompass extent of temporal and spatial differentiation in fate and exposure assessment	Does not take into account the time-space distribution of stressors in a unit process
Assessment scope	Focused on local and site-specific stressors and effects, may shift the effects elsewhere	Focused on global and local emission inventory, site-generic and site-specific impact assessment
Susceptibility	Take into account aspects of distribution and acceptability of risks for specific members of a population such as susceptible individuals	Disregard specific members of a human population

3 评价方法融合研究的进展

通过上述比较可看到, ERA 侧重于化学物质暴露的特定场景, 并对化学物质的摄取机制(如吸入、摄入)进行详细的建模, 以评价构成的威胁. LCA 将大量空间和时间上多样化的排放信息汇集, 并结合从输入到输出的单元过程综合分析不同环境影响. ERA 和 LCA 作为化学品评价方法具有高度的互补性, 提供决策支持上的不同角色和作用^[5,10]. 大量学者从不同的角度提出

了将两种工具结合起来共同用于决策的需求和具体研究案例, 既有评价方法的相互融合, 也有评价结果的综合利用. 本工作综合分析归纳出四类不同的融合方式, 包括整合(Integration)、联合(Combination)、互补(Complementary)和权衡(Trade-off), 并对其中重要的整合评价研究进展予以重点综述.

3.1 两种评价体系的融合方式

3.1.1 整合(Integration)

整合 ERA 与 LCA 意识, 将彼此的数据信息、要素

特性与计算结果融入整合到方法框架中。这类整合评价方式可以从 ERA 的角度出发, 将生命周期评价整合融入化学品环境风险评价方法框架^[6,11], 利用 ERA 手段计算化学物质的潜在风险, 将其引入 LCA 的过程流模型中, 使化学品危害信息与生命周期的单元过程紧密联系^[4]; 在原有的 LCA 框架和环境影响类别基础上, 利用 ERA 暴露模型和计算结果添加表征风险的环境影响类别, 例如人体健康风险、生态风险等 LCA 评价指标, 替代 LCA 原有的一些毒性影响指标^[12-14]。近年提出的化学品足迹(Cheical Footprint, ChF)概念整合 ERA 与 LCA 意识, 以人类为行为主体, 以人类活动排放的化学品为评价主题, 将人类活动排放的化学品对生态系统健康的风险转化为直观的环境空间占用量的形式, 并用于化学品相关的环境风险评价^[15,16]。

3.1.2 联合(Combination)

分别利用 ERA 和 LCA 针对相同的产品系统进行评价, 采用一定的方式(如多目标决策等)综合两种评价的结果^[17]。这类联合评价方式可以通过分别进行 LCA 和 ERA, 对评价结果排序, 找出共同及各自得到的危害比较大的有毒化学物质清单; 将 LCA 对毒性影响类别的评价结果与 ERA 风险评价结果中交叉重叠的部分相互补充分析^[18,19]。

3.1.3 互补(Complementary)

化学品可持续管理的决策研究表明, 在开展筛选层次的 ERA 或优先设置的研究阶段, LCA 评价工具非常有用^[20,21]。先利用 LCA 对某产品或服务的全生命周期过程进行评价, 筛选出环境影响较大的单元过程和有害化学物质, 再针对筛选出的过程及物质进行 ERA。先利用 LCA 识别主要健康和环境问题, 再利用 ERA 进行具体风险分析; 或把 LCA 作为 ERA 框架的子集, 为 ERA 筛选需优先进行风险分析的生命周期阶段^[4,22]; 或把 LCA 环境延伸的输入输出分析(EEIOA)作为对化学物质 ERA 进行空间差异化评价的起点^[23-26]。

3.1.4 权衡(Trade-off)

将 ERA 与 LCA 通过权衡方式进行融合评价研究, 主要为了解决局部风险与全局影响的风险转移问题。通过融合可以弥补 ERA 的评价范围和边界过窄的缺陷, 拓宽其评价环境负面影响的范围, 避免风险转移^[6]。尽管 LCA 可以单独用于局部排放影响的评价, 研究案例表明仍然需要特定点位的环境归趋与暴露模型, 即需要 ERA 手段的介入。对不同产品系统或技术方案进行生命周期影响评价后, 可能出现不同环境影响类型的比较趋势有所差别, 利用 ERA 手段对 LCA 评价结果进行权衡^[27-29]。

3.2 整合生命周期视角的环境风险评价

生命周期视角是指对与特定产品体系相关的物质流动的意识, 从原材料的使用到产品的使用, 到废物的处理, 以及全过程所需的燃料、电力、化学品和基础设施^[30], 是 LCA 框架中量化产品和服务的环境影响的方法。其核心是一个工业生产的模型, 是一个单元过程的网络, 它吸收资源、能源和材料, 并输出产品、排放和废物。将许多这样的单元过程链接在一起模拟产品的生命周期, 使用阶段假设和选择包含或排除哪些过程会对分析结果产生深远的影响。ERA 中的暴露场景建模与 LCA 单元过程描述的活动有关。如一个过程需要一个本身有毒或含有毒物质的输入, 该过程有暴露的风险, 操作过程中工人可能接触到物质, 或者物质可能存在于产品、工业副产品或环境释放过程中。任何这些暴露的来源都可能需要一个 ERA 描述。当 ERA 进行时, 有必要对特定的暴露场景进行一些假设, 以模拟可能的剂量-反应。ERA 的评价结果高度依赖于与暴露相关的 LCA 单元过程^[31]。ERA 通过描述特定的单元过程实现生命周期视角。从本质上讲, ERA 数据可以补充关于 LCA 评价的基本元数据, 例如哪个单元过程导致了被建模的暴露场景, 这个单元过程的产物是什么, 从上游生产工艺流程来看, 有毒物质的来源是什么, 往下游消费环节看, 有毒物质使用后会发生什么, 它是否包含在产品中。如果是这样, 那么在产品生命结束时发生了什么。这种整合生命周期视角的 ERA 方法, 可考虑不同来源的一种或几种物质的排放和在不同位置、不同生命周期阶段的产品或服务^[4,32], 可用于评价底灰处理和循环利用过程中不同环节或服务用途的重金属释放的人体健康风险; 用于研究生物柴油生产链中不同单元过程的人类健康风险^[33,34]。

3.3 基于生命周期过程流模型组织和共享环境风险评价数据

在产品生命周期中, 对工人、消费者和环境的风险会在多个过程中出现, 而不同的公司可能会以不同的方式对其进行评价。产品系统的过程流模型为集成这些不同的报告提供了一个框架, 来自不同特定过程的毒性清单可以立即结合在一起, 建立一个关于特定产品所涉及的有毒物质流的描述。通过这种方式可以识别和评价整个供应链中有毒化学物质的负荷分布, 了解相关的具体过程。使用类似化学物质的不同企业可以将他们的评价结果集中起来, 开发出一个综合的 ERA 数据集。公共机构、非政府组织、研究人员和顾问可以收集不同来源的毒性数据, 并利用过程流模型确定数据或监管范围的差距, 提出更安全的管理策略和技术

方案^[4]。LCA 也可以通过描述中间流(即单元过程之间的流动)解释毒物传递。目前的 LCA 实践通常涉及到向环境排放的流的特性,但在制造过程中使用的流常被忽略。在制造过程中使用的物质可能具有已知的危险性,这些特性可被包括在生命周期模型中。将这些流作为输入(或作为输出)的过程可能具有 ERA 信息,这些 ERA 信息可以被定位并合并到 LCA 分析中。在一个单元过程中使用的有毒物质有可能输出到产品系统中或被释放到环境中,应列入 LCA 排放清单。ERA 的数据例如危险特性和暴露场景,可很容易地放入一个与 LCA 兼容的表单中,并包含在过程库存数据中^[20]。

通过这种整合评价方法,基于工艺流程组织和共享风险评价数据,将为污染防治、产品安全监管和公共卫生提供四方面的决策支持。首先,它将允许一个数据库的分布式开发,跟踪有毒物质的流动。产品的危险特性和 ERA 结果可以向公众公开,而不会泄露机密信息;其次,它将引入一个用于生产的有毒流建模框架。虽然 LCA 在建模资源需求和全球环境影响方面是有效的,但在描述区域和地方对人类和环境健康的威胁方面却不十分有效。如果将毒性信息附加到中间流,LCA 从业者可以在适当的情况下将毒性数据纳入其库存模型中,更好地将毒性数据集成到过程流模型中,了解与特定产品系统或制造技术相关的环境风险,而不仅仅是特定的化学品排放清单。产品中涉及的多种化学品的风险信息可以链接在一起;第三,将毒性信息与单元过程联系起来,建立一种有毒化学品的使用和产品系统功能之间的关系,更加科学地寻找更安全的替代品或替代技术,符合绿色化学的原则^[2];最后,它将有助于向更广泛的研究人员、技术人员、监管人员和公众传播风险信息。过程流模型提供了一个易于理解的工业活动和个人消费之间的映射,已经包含了每个生命周期阶段的风险信息^[4]。

3.4 化学品足迹

化学品足迹(ChF)的概念体现出化学品、生态系统及环境空间三者之间的联系,人类活动排放的化学品通过多种途径进入环境空间,因此暴露于一定化学品水平的生态系统的结构与功能会受到影响,体现出化学品的生态毒性效应。环境空间既能容纳化学品,又能为生态系统提供必要的物质和能量基础,成为人类活动与生态系统健康之间关系的桥梁^[15,35]。ChF 的计算包括三类指标:(1) 人类活动与化学品排放量之间的关系;(2) 化学品对生态系统健康的毒性效应阈值;(3) 环境空间对化学品的消纳能力。指标(1)的度量需基于 LCA 方法体系,跟踪人类活动中化学品的排放量。指

标(2)的度量需要一种可以指示生态系统健康状态的生态效应阈值,可通过 ERA 方法表征。常用的计算方法有两种:一种是以一定时间、环境介质体积内单位质量化学品所影响的物种比例(msPAF)表征生态效应阈值,评价可能导致生态系统承载容量受损的化学品实际环境排放程度^[36]。另一种则是通过 USEtox 模型计算生态毒性影响特征化因子(CF),表征将排放的化学物质稀释到不对生态系统产生危害作用的浓度点以下所需占用的淡水体积^[37]。USEtox 模型是目前整合 LCA 表征化学品生态毒性的最佳模型,其内嵌多介质归趋模型,可以很好地模拟化学品在环境介质中的动态迁移转化和降解等过程。指标(3)的度量,综合考虑生态系统的承载容量和修复能力等因素,通过模型模拟简化定量表示消纳化学品所需要的环境空间^[16]。综上所述,化学品足迹方法的发展无处不体现 ERA 与 LCA 方法的整合互融。

4 融合研究的问题与挑战

无论是化学品环境风险评价还是生命周期评价方法,均需使用大量的测量和模拟数据,针对复杂环境还需进行环境归趋暴露和因果链的简化建模,因此两种评价方法的结果都具有很高的不确定性。ERA 与 LCA 在评价目标与范围、评价层次与类别、地理边界、数据需求、污染排放情况及时空特性等方面都存在显著差异^[20],这为两种方法融合研究的科学性与合理性带来更多的困难与挑战。最近的研究突出了系统假设和价值选择对整体不确定性的贡献^[5]。根据评价目标与评价范围的不同,不确定性的接受程度也各异。例如融合风险信息的产品环境影响的比较,统计显著差异需要更精确的评价。既然是考虑多元信息和多重过程的融合评价研究,则整合评价框架并非简单提供单一答案的工具,而是一个能够全面理解问题及可能解决方案的工具^[38-40]。基于此,从以下四个方面系统分析融合研究面临的诸多问题与挑战。

4.1 化学品基础信息数据的匮乏

ERA 与 LCA 都需要大量的测量和模拟数据来支持。事实上绝大多数化学物质都缺乏足够的实测毒性数据用以评价其危害性质,这需要成本高昂的实验测定^[4]。此外,时间和空间特异的化学品排放量、环境归趋和暴露的数据往往也难以获取。目前的化学品基础数据常常以国家层面为主,缺少局部的、地区的精细化数据,往往以低层次的平均数据近似值替代。这一现象在中国尤其严重^[15]。另一方面,从日益更新的化学品 CAS 号可知,新的化学品源源不断被合成、使用和排

放进入环境, 其基本信息数据收集测定研究显著滞后. 这些新化学物质的数据缺失(Data Gap)可考虑使用定量构效关系(QSAR)模型等计算毒理学手段预测获取^[41].

4.2 时间与空间特异性

区域化的评价方法通过考虑特定地点的生产条件、运输的差异和生态系统的敏感性, 提高评价结果的准确性, 正是化学品 ERA-LCA 融合评价框架的关注焦点. 首先, 化学品环境归趋与暴露的空间特异性是 ERA 评价框架的重要特征. 其次, 为了比较资源利用或环境排放的不同位置对环境的影响, 需应用区域化的 LCA 评价方法. 区域化使融合评价方法更具相关性, 但如何将区域化的 LCA 与空间特异的环境归趋与暴露相匹配仍是很大的挑战. ERA 提供的风险信息往往带有时空分布的显著特征, 事实上化学品的排放数据随时间动态变化. 如果融合研究中仅以稳态模型处理化学品的排放、环境归趋与暴露, 可能降低评价结果的可靠性与实用性. 然而目前存在的问题是缺少数据最合适的空间和时间分辨率. 库存数据主要在国家级可用, 只有个别更精细的空间分辨率的例外情况. 两种评价方法的融合往往需要一个不同的空间分辨率, 它包含的是毒性影响的性质, 而不是行政边界. 将数据的空间与时间分辨率调整到一个适宜的规模, 既能满足区域化动态评价的精细化需要, 又不至于过于复杂从而给两种方法的融合分析计算带来新困难, 这是仍然需面对的挑战之一.

4.3 毒性数据的正确使用与联合毒性表征

ERA 与 LCA 两种方法框架使用各自的毒性数据集, 融合评价方法带来的数据转移可能增加最终评价结果的不确定性. 在 HHRA 中效应阈值评价可基于无观察效应水平 (NOAEL) 或最低观察效应水平 (LOAEL), 也可以采用另一种基准剂量 (BMD) 法, 它同时适用于阈值和非阈值效应, 而风险表征的起始点 (Point of Departure, POD) 通常是 BMDL₁₀ (单边 95% 置信区间的下限). 无论选择哪种阈值作为 POD, 均需要用到一组评价因子 (AFs) 或不确定因子 (UFs) 获得参考剂量 (RfD), 从而与预测的化学物质人体摄入量进行比较. 在 LCA 框架中, 毒性影响评价的数据通常是 EC₁₀ 或 EC₅₀ 数据. 应用一组 AFs 或 UFs 导出 LCIA 中使用的斜率因子. 当特定区域的环境归趋和暴露模型从 HHRA 框架被带入 LCA 框架时, 必须注意彼此毒性数据集的差异.

针对化学物质混合物或者说多重胁迫因子的毒性评价必须考虑复杂的联合毒性作用. 目前联合毒性评价

往往只能简单地采用浓度加合的方式定量化表征, 这是粗暴地假设混合物的各组分彼此独立作用且毒性作用模式相同. 这种简化计算方式忽略了化学物质在环境介质暴露中的化学反应及在生物体内的相互作用 (拮抗或协同). 联合毒性的研究目前尚处于起步阶段, 需毒理学专家系统深入的研究, 包括动物试验、细胞试验和预测毒理学多重手段的联合应用.

4.4 模型耦合的不对称与多元化工具需求

两种评价框架在模型耦合过程中的不对称可能引起潜在偏差. ERA 框架一般使用空间特异的环境归趋与暴露模型评价本地化受体暴露的风险阈值. 在 ERA 视角下, 在不同地方的本地化风险之间可能存在不对称, 只针对本地化风险的直接利益相关者和决策者进行评价, 而对其它地方的风险不评价. 在 LCA 视角下, 基于空间特异模型的集成可能会出现一种更隐蔽的模型不对称形式. 整合 ERA 风险阈值的特定影响类别使用空间特异的本地化模型, 而其它空间过程的影响类别则可能使用通用模型建模, 不考虑空间特异性. 这种情况下, 不同空间过程的模型耦合可能引入模型不对称偏差. 如果不同种类的化学物质具有相似空间范围的影响和相似的暴露途径, 也可根据彼此的空间特异性分别建模, 从而引入模型不对称的偏差. 这种模型不对称影响对融合评价整体结果的影响程度尚不清楚, 并对进一步调查研究提出了新的挑战.

融合评价框架中观点不一致的环境归趋和暴露模型可能引起潜在偏差. 从 ERA 框架到 LCA 框架, 至少有两种方式可能会将不一致的暴露途径假设和参数值的选择传递给 LCA 框架. ERA 的基本原理是确定暴露途径和参数选择, 考虑个体暴露的最恶劣影响. 从 LCA 视角, 这种保守评价方式可能并不合适, 因为可能会有更多的人通过不那么重要的途径暴露, 从而导致潜在累计效应的过高估计. 由于 LCA 反映的是平均条件下的稳态过程, 不考虑个别受体敏感性差异问题, 将 ERA 风险信息聚集和扩展到一个 LCA 功能单元时, 关于个体暴露途径和亚群体效应的细节可能会丢失.

模型化研究是当前理论研究的发展趋势. 融合两种评价方法的整合框架体系自然需要适应不同评价目标的多元化模型工具. 目前专门为融合研究发展或优化的模型工具非常罕见, 仍然主要借助于单一的环境归趋与暴露模型或者 LCA 环境影响评价模型及这两类模型的简单耦合如 USEtox, 也可能存在耦合偏差等问题与挑战.

5 面向绿色化学的应用展望

许多国家和地区对化学品风险控制策略的一个共同手段就是开发使用有毒化学品的绿色替代技术方案。替代技术包括使用较不危险的物质替代有毒化学物质、改进工艺流程以减少有毒化学物质的使用、暴露或释放及通过重新设计产品过程或对主要工艺进行重大调整来减少或消除首要需求的有毒化学物质。对于有毒化学物质,使用整合生命周期视角的 ERA 能评价产品生命周期中过程特异的潜在风险,包括过程中间产物和特殊助剂的使用,从而提出更安全的替代技术方案。美国环保署(USEPA)针对电子制造行业的两项案例研究表明,采用这种融合生命周期视角与风险评价方法,能发现更安全的绿色技术来替代有问题的过程^[42]。短链氯化石蜡(SCCPs)是金属加工工业广泛使用的润滑剂,SCCPs 因其对水生生物具有较强的生殖毒性和免疫毒性而被限制使用,采用融合生命周期与风险分析的替代评价方法,可以证明传统的高压金属成形工艺无法避免使用有害 SCCPs,必须重新设计新的工艺流程^[43]。针对这些绿色替代技术方案,基于上述融合评价方法体系,目前已经提出了多种替代化学品和替代工艺的评价方法框架,其中著名的两个方法框架是 USEPA 的清洁技术替代评价(CTSA)和 Lowell 可持续生产中心的替代评价框架^[4, 44]。

ERA 和 LCA 都是化学品安全评价和可持续管理的重要工具,将两种方法融合可以发展建立更健全更合理的评价框架。这种融合评价框架体系,根据各自的研究目的或评价目标可以选择不同类型的融合方式。既可以通过过程流建模在产品整个生命周期跟踪有毒物质或者将毒性数据整合入生命周期影响评价,比分别评价不同空间过程的风险更直接、成本更低,也可弥补 ERA 的评价范围和边界过窄的缺陷,有助于解决针对 LCA 不同类型环境影响比较趋势不同而需要综合权衡的问题,避免风险转移,从而最终实现人类与生态环境综合可持续发展。将融合评价框架体系应用于中国的化学品风险管理决策中,一方面可为风险防范策略的制定提出科学的理论依据和方法支撑,另一方面也可为绿色化学领域更安全替代化学品和替代技术的选择提供强有力的评价方法支持。

参考文献

- [1] 刘建国,李力,胡建信.高关注物质(SVHCs):中国化学品风险管理体系、能力和基础研究挑战[J].科学通报,2013,58(26): 2643–2650.
- Liu J G, Li L, Hu J X. Substances of very highly concerned (SVHCs): regime, capacity and fundamental research challenge for

- chemical risk management in China [J]. Chinese Science Bulletin, 2013, 58(26): 2643–2650.
- [2] Anastas P T, Warner J C. Green chemistry: theory and practice [M]. London: Oxford University Press, 2000: 1–140.
- [3] Tickner J A, Geiser K. The precautionary principle stimulus for solutions- and alternatives-based environmental policy [J]. Environmental Impact Assessment Review, 2004, 24(7): 801–824.
- [4] Kuczenski B, Geyer R, Boughton B. Tracking toxicants: toward a life cycle aware risk assessment [J]. Environmental Science & Technology, 2011, 45(1): 45–50.
- [5] Harder R, Holmquist H, Molander S, et al. Review of environmental assessment case studies blending elements of risk assessment and life cycle assessment [J]. Environmental Science & Technology, 2015, 49(22): 13083–13093.
- [6] 孙赵鑫,施晓清,杨建新.生命周期评价与环境风险评价方法整合研究述评[C]//全球可持续发展报告征文. 2015: 210–215.
- Sun Z X, Shi X Q, Yang J X. Integrated research on lifecycle analysis and environmental risk evaluation methods [C]//Global Sustainable Development Report Brief. 2015: 210–215.
- [7] Hellweg S, Mil I, Canals L. Emerging approaches, challenges and opportunities in life cycle assessment [J]. Science, 2014, 344: 1109–1013.
- [8] Hauschild M Z, Goedkoop M, Guin E J, et al. Identifying best existing practice for characterization modeling in life cycle impact assessment [J]. International Journal of Life Cycle Assessment, 2013, 18(3): 683–697.
- [9] Rack M, Valdivia S, Sonnemann G. Life cycle impact assessment—where we are, trends, and next steps: a late report from a UNEP/SETAC Life Cycle Initiative workshop and a few updates from recent developments [J]. International Journal of Life Cycle Assessment, 2013, 18(7): 1413–1420.
- [10] Barberio G, Scalbi S, Buttol P, et al. Combining life cycle assessment and qualitative risk assessment: the case study of alumina nanofluid production [J]. Science of the Total Environment, 2014, 496: 122–131.
- [11] Aissani L, Jabouille F, Bourgois J, et al. A new methodology for risk evaluation taking into account the whole life cycle (LCRA): validation with case study [J]. Process Safety and Environment Protection, 2012, 90(4): 295–303.
- [12] Kobayashi Y, Peters G M, Khan S J. Towards more holistic environmental impact assessment: Hybridisation of life cycle assessment and quantitative risk assessment [J]. Procedia CIRP, 2015, 29: 378–383.
- [13] Notarnicola B, Sala S, Anton A, et al. The role of life cycle assessment in supporting sustainable agri-food systems: a review of the challenges [J]. Journal of Cleaner Production, 2017, 140: 399–409.
- [14] Walker W C, Bosso C J, Eckelman M, et al. Integrating life cycle assessment into managing potential EHS risks of engineered nanomaterials: reviewing progress to date [J]. Journal of Nanoparticle Research, 2015, 17(8): 344.
- [15] 杜翠红,王中钰,陈景文,等.化学品足迹:概念、研究进展及挑战[J].生态毒理学报,2016,11(2): 18–26.
- Du C H, Wang Z Y, Chen J W, et al. Chemical footprint: concepts, research progress and challenges [J]. Asian Journal of Ecotoxicology, 2016, 11(2): 18–26.
- [16] Sala S, Goralczyk M. Chemical footprint: a methodological

- framework for bridging life cycle assessment and planetary boundaries for chemical pollution [J]. *Integrated Environmental Assessment and Management*, 2013, 9(4): 623–632.
- [17] Posthuma L, Brown C D, Zwart D D, et al. Prospective mixture risk assessment and management prioritizations for river catchments with diverse land uses [J]. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 2018, 37(3): 715–728.
- [18] Mattila T, Verta M, Sepp L J. Comparing priority setting in integrated hazardous substance assessment and in life cycle impact assessment [J]. *International Journal of Life Cycle Assessment*, 2011, 16(8): 788–794.
- [19] Lim S R, Lam C W, Schoenung J M. Priority screening of toxic chemicals and industry sectors in the U.S. toxics release inventory: a comparison of the life cycle impact-based and risk-based assessment tools developed by U.S. EPA [J]. *Journal of Environmental Management*, 2011, 92(9): 2235–2240.
- [20] Christensen F M, Olsen S I. The potential role of life cycle assessment in regulation of chemicals in the European Union [J]. *International Journal of Life Cycle Assessment*, 2004, 9(5): 327–332.
- [21] Pennington D W, Bare J C. Comparison of chemical screening and ranking approaches: the waste minimization prioritization tool versus toxic equivalency potentials [J]. *Risk Analysis*, 2001, 21(5): 897–912.
- [22] Tiruta-Barna L, Benetto E, Perrodin Y. Environmental impact and risk assessment of mineral wastes reuse strategies: review and critical analysis of approaches and applications [J]. *Resources Conservation and Recycling*, 2007, 50(4): 351–379.
- [23] Nishioka Y, Levy J, Norris G A, et al. A risk-based approach to health impact assessment for input–output analysis, part 1: methodology [J]. *International Journal of Life Cycle Assessment*, 2005, 10(3): 193–199.
- [24] Nishioka Y, Levy J, Norris G A, et al. A risk-based approach to health impact assessment for input–output analysis, part 2: case study of insulation [J]. *International Journal of Life Cycle Assessment*, 2005, 10(4): 255–262.
- [25] Rehr A P, Small M J, Matthews H S, et al. Economic sources and spatial distribution of airborne chromium risks in the U.S [J]. *Environmental Science & Technology*, 2010, 44(6): 2131–2137.
- [26] Wright H E, Zhang Q, Mihelcic J R. Integrating economic input–output life cycle assessment with risk assessment for a screening-level analysis [J]. *International Journal of Life Cycle Assessment*, 2008, 13(5): 412–420.
- [27] Lemming G, Chambon J C, Binning P J, et al. Is there an environmental benefit from remediation of a contaminated site? combined assessments of the risk reduction and life cycle impact of remediation [J]. *Journal of Environmental Management*, 2012, 112(24): 392–403.
- [28] Lemming G, Hauschild M Z, Chambon J, et al. Environmental impacts of remediation of a trichloroethene-contaminated site: life cycle assessment of remediation alternatives [J]. *Environmental Science & Technology*, 2010, 44(23): 9163–9169.
- [29] Sparrevik M, Saloranta T, Cornelissen G, et al. Use of life cycle assessments to evaluate the environmental footprint of contaminated sediment remediation [J]. *Environmental Science & Technology*, 2011, 45(10): 4235–4241.
- [30] Rebitzer G, Ekvall T, Frischknecht R, et al. Life cycle assessment: part 1: framework, goal and scope definition, inventory analysis, and applications [J]. *Environment International*, 2004, 30(5): 701–720.
- [31] Haes H A U D, Sleeswijk A W, Heijungs R. Similarities, differences and synergisms between HERA and LCA: an analysis at three levels [J]. *Human & Ecological Risk Assessment*, 2006, 12(3): 431–449.
- [32] Dhingra R, Naidu S, Upreti G, et al. Sustainable nanotechnology: through green methods and life-cycle thinking [J]. *Sustainability*, 2010, 2(10): 3323–3338.
- [33] Shi H C, Ma H W. Life cycle risk assessment of bottom ash reuse [J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2011, 190(1): 308–316.
- [34] Milazzo M F, Spina F. The use of the risk assessment in the life cycle assessment framework: human health impacts of a soy-biodiesel production [J]. *Management of Environmental Quality*, 2015, 26(3): 389–406.
- [35] Čucek L, Klemes J J, Kravanja Z A. Review of footprint analysis tools for monitoring impacts on sustainability [J]. *Journal of Cleaner Production*, 2012, 34(1): 9–20.
- [36] Zijp M C, Posthuma L, Van de Meent D. Definition and applications of a versatile chemical pollution footprint methodology [J]. *Environmental Science & Technology*, 2014, 48(18): 10588–10597.
- [37] Bjrn A, Diamond M, Birkved M, et al. Chemical footprint method for improved communication of freshwater ecotoxicity impacts in the context of ecological limits [J]. *Environmental Science & Technology*, 2014, 48(22): 13253–13262.
- [38] De Schryver A M, Humbert S, Huijbregts M A J. The influence of value choices in life cycle impact assessment of stressors causing human health damage [J]. *International Journal of Life Cycle Assessment*, 2013, 18(3): 698–706.
- [39] Gregory J R, Montalbo T M, Kirchain R E. Analyzing uncertainty in a comparative life cycle assessment of hand drying systems [J]. *International Journal of Life Cycle Assessment*, 2013, 18(8): 1605–1617.
- [40] Groen E A, Heijungs R. Ignoring correlation in uncertainty and sensitivity analysis in life cycle assessment: what is the risk? [J]. *Environmental Impact Assessment Review*, 2017, 62: 98–109.
- [41] 王中钰, 陈景文, 乔显亮, 等. 面向化学品风险评价的计算(预测)毒理学 [J]. *中国科学: 化学*, 2016, 46(2): 1–21.
Wang Z Y, Chen J W, Qiao X L, et al. Toward chemical risk assessment: computational (predictional) toxicology [J]. *Science China Chemistry*, 2016, 46(2): 1–21.
- [42] Geibig J R, Swanson M B. Printed wiring board industry—surface finishes-cleaner technologies substitutes assessment [M]. Washington, DC: U.S. Environmental Protection Agency, 2001: 1–15.
- [43] Skak C, Rasmussen O, Nilsson M, et al. Mapping and development of alternatives to chlorinated lubricants in the metal industry (KLORPARAFRI) [M]. Copenhagen, Denmark: Danish Ministry of the Environment, 2005: 40–51.
- [44] Rossi M, Tickner J, Geiser K. Alternatives assessment framework of the Lowell Center for Sustainable Production [M]. Lowell, MA: Lowell Center for Sustainable Production, 2006: 11–14.