

다매체 환경 모델 MUSEM을 이용한 유해화학물질의 환경거동예측 모델링

노경준¹ · 김동명^{2,†}

¹부경대학교 환경시스템공학부 환경공학전공

^{2,†}부경대학교 환경시스템공학부 생태공학전공

Modeling for the Fate of Organic Chemicals in a Multi-media Environment Using MUSEM

Kyong Joon Roh¹ and Dong-Myung Kim^{2,†}

¹Major of Environmental Engineering, Pukyong National University, Busan 608-737, Korea

^{2,†}Major of Ecological Engineering, Pukyong National University, Busan 608-737, Korea

요 약

생태계로 유입되는 POPs, EDCs, PBTs 등과 같은 화학물질에 의한 오염은 점점 복잡다양화되고 있으며, 사람의 건강이나 생태계에 돌이킬 수 없는 피해를 가져올 우려 또한 증가되고 있다. 그러나 위해성평가의 중요한 과정중 하나인 화학물질의 노출량 산정 부분에 대한 적절한 평가가 이루어지지 않는 경우가 많았다. 본 연구에서는 환경매체 중 화학물질량 산정에 있어 보다 효율적인 모델링 수행을 위하여, 화학물질의 물성 데이터베이스 및 지역 개황 데이터베이스 등과 프로그램으로 연계 되어 있으며, 동시에 여러 대상물질이 시뮬레이션 가능한 다매체환경모델 MUSEM (MUlti-media Simple box-systems Environmental Model)을 이용하여 62종의 화학물질에 대하여 일본 47개 지역의 환경매체 중 농도예측 및 동경지역에 대한 민감도 분석을 통하여 모델의 적용성을 검토하였다. 이러한 62종의 물질에 대한 매체별 잔류비(%)는 수역에 고비율로 분포하는 물질이 많은 것으로 예측되었다. 옥탄올-물 분배계수에 따른 환경매체중의 화학물질 농도변화는 도시산업용지의 토양 및 담수의 저질에서 상대적으로 크게 나타났으며, 대기와 담수에서는 상대적으로 작게 나타났다. 분배계수에 의한 환경매체중의 화학물질 농도변화는 육수역 물환경 및 도시산업용지의 토양, 육수역의 저질에서의 변화폭이 비슷하게 나타났으며 대기의 경우는 상대적으로 작게 나타났다.

Abstract – Pollution by chemical substances such as POPs, EDCs and PBTs in the ecosystem has become more complex and varied, increasing the possibility of irreversible damage to human health or the ecosystem. It is necessary to have a exposure assessment in a multi-media environment for various chemical substances is required for efficient management. This study applied MUSEM (MUlti-media Simplebox-systems Environmental Model), a multimedia environmental model that can simultaneously evaluate the possibility of exposure of hundreds of chemical substances in order to efficiently manage chemical substances that can have negative impact on human health or ecological environment through environmental contamination. MUSEM executed the modeling for Japan by setting all 47 prefectures of Japan as the regional area for 62 chemical substances and the rest of the territory of Japan, excluding regional area, as the continental area and made the estimation of concentration among environment media in each administrative area and made the sensitivity analysis on Tokyo area. The results of simulation for chemical distribution showed that most of the target chemicals located in water region. The result of sensitivity analysis for octanol-water partition rate showed that the concentration change of soil in urban/industrial area and sediment in freshwater was high. In the case of sensitivity analysis for degradation rate showed that the concentration change of freshwater, soil in urban/industrial area, and sediment in freshwater was high.

Keywords: Multi-media Environmental Model(다매체환경모델), Exposure Assessment(노출평가), Risk Assessment(위해성평가), PRTR, TRI, MUSEM

[†]Corresponding author: dmkim@pknu.ac.kr

1. 서 론

생태계로 유입되는 POPs (Persistent Organic Pollutants), EDCs (Endocrine Disrupting Chemicals), PBTs (Persistent Bio-accumulative and Toxic substances) 등과 같은 화학물질에 의한 오염은 점점 복잡다양화되고 있으며, 사람의 건강이나 생태계에 돌이킬 수 없는 피해를 가져올 우려 또한 증가되고 있다.

이들 화학물질 중에는 잔류성이 큰 물질도 많으며, 초기단계에 해양환경으로 배출된 경우뿐만 아니라 타 환경매체에 유출된 경우도 최종적으로는 해양생태계에 유입될 가능성이 크다. 또한, 인간이 섭취하는 수산물의 경우 육상에서 사육된 가축에 비하여 생태계 먹이피라미드 상에서 상위에서 위치하는 경우가 많아 먹이연쇄를 통한 화학물질의 농축 및 이동 또한 우려된다.

화학물질은 현 순간에도 지속적으로 신규물질이 개발·제조 및 유통되고 있으며, 생태계로 유입되는 물질의 수와 양도 증가되고 있다. 환경부(2005)에 의하면 전 세계적으로 유통되고 있는 화학물질의 수는 10만여종에 이르며 국내에서도 3만8천여종의 화학물질이 사용되고 있다. 또한 매년 2천여종의 새로운 물질이 개발되어 상품화되고 있으며, 국내의 경우도 매년 3백여종의 새로운 화학물질이 국내시장으로 진입되고, 화학물질의 유통량도 증가하고 있다. 뿐만 아니라 화학물질의 생산량 또한 국제적으로 지속적으로 증가하고 있어 환경 친화적 화학물질 관리정책의 도입 및 지원이 국제사회의 주요 현안으로 부각되고 있다(환경부, 2005). 이러한 화학물질에 대한 평가와 관리의 우선순위설정이 필요하며 이를 위해서는 각 환경 매체별 노출가능성의 평가가 필수적이다.

현재까지 위해성평가를 위한 Davis 등(1994)의 연구를 비롯하여 Swanson 등(1997), Snyder 등(2000), 차 등(2003)의 많은 국내외 연구에서 화학물질의 노출가능성 부분을 배출량자료를 이용하거나 화학물질의 물리화학적 특성에 배경하여 평가하여, 화학물질의 노출량 산정 부분에 적절한 평가가 이루어지지 않는 경우가 많았다. 환경오염을 통해 인간의 건강이나 생태계에 좋지 않은 영향을 미칠 우려가 있는 화학물질의 잠재적 영향을 미연에 방지하기 위해서는 과학적인 노출평가 기법을 이용한 효율적인 관리가 필요하며, 보다 적절한 위해성평가가 가능하도록 다매체환경(대기, 물환경, 토양, 저질 등)중 화학물질 거동 및 운명을 예측 평가할 수 있는 수치모델을 이용한 시스템의 도입이 필수적이다.

다매체환경모델은 환경매체로 배출이동된 후 이류, 확산, 분해 등의 기작을 통해 대기, 물, 토양, 저질 등의 다매체 중에 잔류하며, 노출과 섭취를 통해 생체반응을 일으켜 독성을 나타내는 일련의 환경매체 중 거동 및 화학물질 운명예측에 관해 모의할 수 있는 모델로 초기 리스크 평가와 화학물질관리 우선순위 결정에 유용한 모델이다. 대표적인 모델로는 Fugacity model I, II, III, IV (Cahill *et al.*, 2003), EQC model (Mackay *et al.*, 1996), CalTOX (California EPA, 1993), MNSEM2 (Environment Agency of Japan, 1993), USES (Polder *et al.*, 1998; Van Leeuwen *et al.*, 1996) 등이 있다. 국내에서는 박(EQC, 2003), 김 등(EQC, 2005) 등이 다

매체 모델의 개량 및 적용에 관하여 연구 보고하고 있다. 이러한 기존의 연구에서 화학물질의 거동 및 운명 예측시 적용된 모델은 하나 또는 수개의 물질에 대한 모델링에는 유용한 점이 있으나 우선순위결정의 경우와 같이 관리대상인 수십 또는 수백종의 화학물질을 동시에 시뮬레이션 하여 환경매체중의 농도를 산정, 비교 평가하거나 새로운 화학물질이나 물성치 등의 조사 연구가 아직 이루어지지 않는 물질의 경우에는 많은 제약을 가지고 있었다.

본 연구에서, 화학물질관리에 보다 효율적인 모델링 수행을 위하여 화학물질의 물성 데이터베이스 및 지역 개황 데이터베이스 등과 프로그램으로 연계 되어 있으며, 동시에 여러 대상물질이 시뮬레이션 가능한 다매체환경모델 MUSEM (Multi-media Simple box-systems Environmental Model)을 이용하여 62종의 화학물질에 대하여 일본 47개 지역의 환경매체 중 농도예측 및 동경지역에 대한 민감도 분석을 통하여 모델의 적용성을 검토하였다. 이를 통하여 화학물질 관리의 우선순위 결정 및 해양내 존재할 가능성이 큰 신규 화학물질의 관리를 위한 기초 자료를 제공하고자 하였다.

2. MUSEM (Multi-media Simplebox-systems Environmental Model)

본 연구에서는 Shiraishi 와 Roh에 의해 개발된 다매체환경모델 MUSEM (Multi-media Simplebox-systems Environmental Model)을 사용하였다(Roh *et al.*, 2004a; Roh *et al.*, 2004b; Shiraishi and Roh, 2004).

화학물질은 환경매체로 배출이동된 후 이류, 확산, 분해 등의 기작을 통해 대기, 물, 토양, 저질 등의 다매체중에 잔류하며, 노출과 섭취를 통해 생체반응을 일으켜 독성을 나타내는 일련의 환경매체중 거동 및 운명을 거친다.

다매체환경모델 MUSEM은 환경매체중의 화학물질이 다매체를 통하여 인간의 건강이나 생태계에 미치는 영향을 파악하고자 개발되었으며, 화학물질 거동 및 관련 독성 자료를 기초로 하여 위해성평가를 행할 수 있다. 본 모델은 ① 모델링을 위한 화학물질의 물성 등의 입력, ② 화학물질의 배출량산정, ③ 환경중 화학물질 거동예측, ④ 각 환경매체로부터 화학물질 섭취량 산정의 노출평가, ⑤ 위해성평가 지침치의 선정, ⑥ 위해성평가의 6가지 Main Module로 구성되어 있다.

화학물질의 환경중 거동 파악을 위한 MUSEM의 환경규모 (Environmental scale)는 다매체환경 규모를 주로 200 km² 이내의 범위인 지역규모의 Regional scale (연구대상지역)과 연구대상지역의 주변을 둘러싸고 있는 국가규모의 Continental scale (1900 km² 이내), 그리고 Continental scale을 포함하는 지구규모의 Global scale (북반구)로 구분하였다. MUSEM의 Environment compartments는 Regional area와 Continental area의 각각의 scale에 대해서 대기, 물환경(육수역, 해수역으로 구분), 토양(자연지, 농지, 도시산업용지로 구분), 저질(육수역, 해수역으로 구분)의 8개의 환경매체로 구성, 화학물질 농도 예측을 위한 최소단위로 다루었다.

수십 또는 수백종의 물질을 동시에 시뮬레이션 가능하도록, 연구대상지역의 특성값 및 화학물질의 배출량 조사결과치, 그리고 옥탄올-물 분배계수, 헨리상수 등의 물질의 특성치의 입력사항을 데이터베이스로 구축하여 MUSEM내부로 연계시킬 수 있다. 또한 화학물질의 모니터링 데이터가 존재하는 경우 모델 예측결과와 비교 가능하도록 실측치자료에 대해서도 연계시킬 수 있다.

3. 환경매체 시뮬레이션

다매체환경중 화학물질거동을 예측하기 위해, 일본지역에서 배출량이 알려져 있는 물질 62종을 중심으로 각 매체중의 화학물질 농도를 예측하였다(Table 1). 추정된 화학물질 농도는 실측치와 비교분석하였으며, 민감도 분석을 실시하였다.

3.1 모델입력자료 선정

3.1.1 대상지역 선정

일본에서 배출되고 있는 화학물질의 영향을 파악하고자 한 물질당 일본의 전 행정구역 47개의 도도부현(都道府県)을 모두 Regional area로 설정하였으며, 이때 선택된 Regional area를 제외한 나머지의 일본전국토를 Continental area로 하여 모델링을 실시하여 그 결과를 상호비교 평가하였다.

지역데이터베이스의 일반현황은 일본 각 행정구역별 인구수는 日本総務省統計局(2002) 자료를 이용하였으며, 각 지역별 면적 및 토양별 비율은 日本総務省統計局(2002)과 日本総務省統計局(2001) 자료를 바탕으로 산정하였다. 각 대상지역의 면적 및 토지 비율은 대기, 물, 토양, 저질 등의 환경매체들의 체적을 구하였다. 하수처리장 규모를 산정하기위한 하수도 보급률은 日本水道産業新聞社(2002)의 자료를 이용하였다. Continental area의 인구수 및 면적은 일본전국의 값에서 Regional area의 규모를 제외한 값으로 하였으며, 하수처리장규모를 산정하기위한 하수도 보급률은 일본전국의 값을 적용하였다. 대기의 혼합고는 1 km, 토양의 반응 깊이는 환경매체에 따라 0.05~0.2 m로 하였다(Table 2).

3.1.2 대상물질 선정

본 연구에서는, chloroform 등이 지정되어 있는 고농축성은 없지만, 난분해성으로 인간에게 장기독성의 우려가 있는 화학물질인 제2종감시화학물질(일본의 화학물질 분류체계) 중 PRTR데이터가 활용 가능한 62종을 대상으로 MUSEM을 이용하여 환경매체중의 농도를 추정하며, 분자량, 용해점, 끓는점, 증기압, 용해도, 옥탄올-물 분배계수 등의 각 화학물질의 물성치를 MUSEM의 입력자료

로 사용하였다(Table 3).

3.1.3 화학물질 배출량 산정

실측치비교와 민감도 분석을 위한 대상물질의 배출량은 일본의 화학물질 배출-이동량 신고제도(PRTR; The Japanese Pollutant Release and Transfer Register)의 배출량조사결과 데이터(日本環境省・経済産業省, 2003; 日本環境省, 2003)를 활용하여, 일본 전 행정구역 47개소(Regional area)와 Continental area 각각에 대하여 환경매체(대기, 육수역 물환경, 해수역 물환경, 토양)별 화학물질배출량을 산정하였다.

62종의 화학물질중 동경지역에서는 dichloromethane의 환경중 배출량이 20,397 kg/day(대기 99.91%)로 가장 많았으며, 다음으로 n,n-dimethylformamide 5,575 kg/day(대기 83.39%, 물환경 3.81% 등), 1,2-dichloropropane 972 kg/day(대기 99.81%), 1,3-dichloropropene 717 kg/day(대기 74.02%, 물환경 25.98% 등), 1,3-butadiene 696 kg/day(대기 100%) 등의 순으로, 상위 5종의 화학물질 대부분은 대기중으로 배출되는 것으로 나타났다. 또한 4-ethenylcyclohexene을 포함한 12종의 화학물질은 동경에서는 배출되지 않는 것으로 나타났다.

일본전역의 경우, 화학물질 배출량은 dichloromethane 229,509 kg/day(대기 99.92%), n,n-dimethylformamide 74,094 kg/day(대기 83.53%), 1,3-dichloropropene 19,957 kg/day(대기 74.05%, 물환경 25.95%)의 순으로 나타났다.

3.2 환경매체중 화학물질 분포 및 실측치와 비교평가

62종의 화학물질에 대한 MUSEM의 예측결과, 일본전지역을 대상으로 한 환경매체(대기, 육수역 물환경, 도시산업용지)중 농도는 Fig. 1에, Regional area를 동경으로 하였을 때의 환경매체별 잔류분포(%)는 Fig. 2와 같다.

동경지역에 있어서 각 매체별 잔류량 분포를 살펴보면, 한 매체에 50%이상 다량 분포하는 물질은 대기의 경우 1,3-butadiene(99.8%) 등 16종, 물환경의 경우 piperazine(99.8%) 등 41종에 달했다. 토양의 경우는 p-chloronitrobenzene(88.5%) 등의 3종이 50%이상 다량 분포하였고, 저질의 경우는 tri-n-butyl phosphate이 21.9%로 가장 높은 분포비를 나타내는 것으로 예측되었다.

이러한 62종의 제2종감시화학물질에 대한 매체별잔류비(%)는 수역에 높은 비율로 분포하는 물질이 많은 것으로 예측되었다.

日本環境省의 黒本調査데이터 등의 실측치를 참조할 수 있도록 구축한 실측치데이터베이스를 이용하여 19종의 화학물질에 대하여 모델의 예측결과와 비교 평가를 실시하였다. 일본의 47개의 행정구역에 대한 각 항목별 MUSEM을 이용한 모델 결과치와 실측치 비교는 Fig. 3에 나타내었다. 다매체 모델의 경우 수환경모델, 대기환경모델 등과 같이 일반적인 특정 환경에 대한 모델의 모델링 과정과는 그 특성이 다르다. 실측치와 예측치의 차이가 대기환경의 경우에 비하여 상대적으로 큰 수환경 및 저질환경의 경우 각 환경매체별, 물질별 분배계수와 시스템 바깥지역으로의 이동 등에 대한 연구가 진행되어 데이터베이스화 된다면 좀 더 양호한 결과

Table 1. Input data of environmental characteristics for calibration and sensitivity analysis in MUSEM

Regional area	47 Prefectures of Japan
Continental area	Japan except Regional area
Substances	62 chemicals substances (Type II Monitoring chemical substances in Japan)
Emission load	Emission database by PRTR result

Table 2. Input data of regional characteristics in Japan for calibration and sensitivity analysis in MUSEM

Area code	Area name	Population (×1000)	Area (km ²)	Area ratio(%)				Sewage supply(%)
				forest	agri. area	urbanInd. area	surface water area	
	Japan (Whole country)	127,432	377,880	66.1	13.2	17.80	2.90	62
1	Hokkaido	5,670	83,454	68.3	15.2	14.18	2.32	82
2	Aomori-ken	1,469	9,235	64.9	17.1	15.43	2.57	40
3	Iwate-ken	1,407	15,279	75.4	10.8	12.56	1.24	35
4	Miyagi-ken	2,371	6,862	56.9	19.7	20.26	3.14	65
5	Akita-ken	1,176	11,434	70.8	13.4	13.07	2.73	37
6	Yamagata-ken	1,235	7,394	69.1	13.9	14.93	2.07	50
7	Fukushima-ken	2,120	13,783	68.6	11.7	17.12	2.58	33
8	Inaraki-ken	2,990	6,096	32.0	30.4	30.20	7.40	43
9	Tochigi-ken	2,010	6,408	54.7	21.0	20.96	3.34	46
10	Gumma-ken	2,032	6,363	64.1	13.5	20.18	2.22	37
11	Saitama-ken	7,001	3,767	33.1	23.4	37.94	5.56	67
12	Chiba-ken	5,994	4,996	32.6	27.3	36.80	3.30	57
13	Tokyo-to	12,219	2,102	36.7	4.3	55.84	3.16	97
14	Kanagawa-ken	8,625	2,415	40.3	9.2	47.52	2.98	92
15	Niigata-ken	2,465	10,939	62.5	14.6	20.30	2.60	41
16	Toyama-ken	1,119	2,802	56.5	14.7	25.46	3.34	45
17	Ishikawa-ken	1,180	4,185	66.4	11.3	20.65	1.65	59
18	Fukui-ken	828	4,189	74.4	10.4	12.96	2.24	57
19	Yamanashi-ken	889	4,201	77.8	6.3	13.44	2.46	55
20	Nagano-ken	2,217	12,598	75.0	8.9	14.43	1.67	56
21	Gifu-ken	2,111	10,209	80.0	5.8	12.06	2.14	49
22	Shizuoka-ken	3,786	7,329	63.7	10.3	22.22	3.78	44
23	Aichi-ken	7,123	5,118	43.5	16.9	36.06	3.54	56
24	Mie-ken	1,861	5,761	65.6	11.6	19.67	3.13	26
25	Shiga-ken	1,359	3,855	50.9	14.2	15.83	19.07	64
26	Kyoto-fu	2,642	4,613	75.2	7.4	15.58	1.82	81
27	Osaka-fu	8,815	1,893	31.4	8.5	55.87	4.23	83
28	Hyogo-ken	5,578	8,392	68.1	9.8	19.82	2.28	82
29	Nara-ken	1,438	3,691	77.2	6.7	14.07	2.03	59
30	Wakayama-ken	1,061	4,726	77.0	8.0	12.63	2.37	10
31	Tottori-ken	612	3,507	74.2	11.1	12.65	2.05	43
32	Shimane-ken	757	6,707	78.9	6.4	11.17	3.53	25
33	Okayama-ken	1,953	7,009	68.4	10.7	18.54	2.36	39
34	Hiroshima-ken	2,878	8,477	73.2	7.7	17.78	1.32	57
35	Yamaguchi-ken	1,518	6,111	71.3	9.1	18.22	1.38	47
36	Tokushima-ken	820	4,145	75.4	8.6	12.89	3.11	11
37	Kagawa-ken	1,021	1,862	47.6	19.1	30.15	3.15	28
38	Ehime-ken	1,486	5,676	70.5	11.1	17.18	1.22	36
39	Kochi-ken	810	7,105	83.4	4.3	10.53	1.77	23
40	Fukuoka-ken	5,043	4,840	44.9	19.3	32.90	2.90	64
41	Saga-ken	874	2,439	44.4	24.3	28.76	2.54	26
42	Nagasaki-ken	1,507	4,093	59.0	13.4	26.94	0.66	42
43	Kumamoto-ken	1,858	6,908	62.9	17.4	18.20	1.50	46
44	Oita-ken	1,219	5,804	71.0	10.3	17.22	1.48	34
45	Miyazaki-ken	1,167	6,685	75.9	9.4	12.81	1.89	37
46	Kagoshima-ken	1,779	9,132	63.6	14.3	21.02	1.08	33
47	Okinawa-ken	1,339	2,272	47.2	18.8	-	-	56

Table 3. Input data of physico-chemical properties for calibration and sensitivity analysis in MUSEM

Compound Name	No	CAS No	PRTR No	Molecular weight (g/mol)	Fusion point (°C)	Boiling point (°C)	Vapor pressure (mmHg)	Solubility (mg/L)	Octanol-water partition coefficient (logPow)
p-chloronitrobenzene	1	100-00-5	237	157.56	85	358.15	0.0219	225	2.39
p-nitroaniline	2	100-01-6	234	138.13	147.65	420.8	3.2E-06	728	1.39
4-ethenylcyclohexene	3	100-40-3	255	108.18	-61.89	211.26	15.7	50	3.93
methylaniline	4	100-61-8	323	107.16	-57	216.15	0.453	5620	1.66
2-vinylpyridine	5	100-69-6	256	105.14	-15.16	257.99	2.78	27500	1.54
moca	6	101-14-4	120	267.16	110	383.15	2.86E-07	13.9	3.91
p-chloroaniline	7	106-47-8	72	127.57	72.65	345.8	0.027	3900	1.83
allylglycidylether	8	106-92-3	23	114.15	-44.51	228.64	4.3	43260	0.45
1,3-butadiene	9	106-99-0	268	54.09	-108.75	164.4	2110	735	1.99
ethylidenedichloride	10	107-06-2	116	98.96	-35.31	237.84	78.9	8600	1.48
m-phenylenediamine	11	108-45-2	264	108.14	66.1	339.25	0.00209	238000	-0.33
cyanuricchloride	12	108-77-0	212	184.41	154	427.15	0.023	401	1.73
piperazine	13	110-85-0	258	86.14	106	379.15	0.16	1000000	-1.5
diethylenetriamine	14	111-40-0	17	103.17	-39	234.15	0.232	1000000	-2.13
TCEP	15	115-96-8	352	285.49	-35	238.15	0.0613	7000	1.44
decabromodiphenyl ether	16	1163-19-5	197	959.17	295	568.15	4.67E-12	0.0001	12.11
2,6-dichlorobenzonitrile	17	1194-65-6	143	172.01	144.2	417.35	0.00101	21.2	2.74
3,3'-dimethylbenzidine	18	119-93-7	171	212.3	131.5	404.65	6.92E-07	1300	2.34
fenitrothion	19	122-14-5	192	277.24	-273	0.15	0.000054	38	3.3
simazine	20	122-34-9	90	201.66	226.15	499.3	2.21E-08	6.2	2.18
1,4-dioxane	21	123-91-1	113	88.11	11.95	285.1	38.1	1000000	-0.27
tri-n-butyl phosphate	22	126-73-8	354	266.32	-79	194.15	0.00113	280	4
tetramethylthiuram disulfide	23	137-26-8	204	240.43	155.75	428.9	1.73E-05	30	1.73
ziram	24	137-30-4	249	305.8	250	523.15	7.5E-09	65	1.23
p-phenetidine	25	156-43-4	265	137.18	2.4	275.55	0.0105	7510	1.24
cis-1,2-dichloroethylene	26	156-59-2	118	96.94	-80.35	192.8	200	6410	1.86
trans-1,2-dichloroethylene	27	156-60-5	119	96.94	-49.65	223.5	331	4520	2.09
tetrachloroisophthalonitrile	28	1897-45-6	199	265.91	250	523.15	5.7E-07	0.6	3.05
EPN	29	2104-64-5	37	323.31	35.2	308.35	9.5E-07	3.11	4.78
dinitrotoluene	30	25321-14-6	157	546.41	60	333.15	0.000397	270	2.18
hydrazine	31	302-01-2	253	32.05	2.15	275.3	14.4	1000000	-2.07
linuron	32	330-54-1	129	233.1	158.15	431.3	6.9E-08	42	2.68
diazinon	33	333-41-5	185	304.35	120.15	393.3	9.01E-05	40	3.81
BPMC	34	3766-81-2	330	207.27	31.5	304.65	0.000143	420	2.78
1,3-dichloropropene	35	542-75-6	137	110.97	-83.85	189.3	34	2800	2.04
ethylenediaminetetraacetic acid	36	60-00-4	47	292.25	245	518.15	4.98E-13	1000	-3.86
dimethoate	37	60-51-5	156	229.26	52.15	325.3	8.25E-06	25000	0.78
amitrole	38	61-82-5	19	84.08	159	432.15	4.4E-07	280000	-0.86
thiourea	39	62-56-6	181	76.12	182.15	455.3	0.0028	142000	-1.08
dichlorvos	40	62-73-7	350	220.98	25.15	298.3	0.0158	8000	1.47
chloroform	41	67-66-3	95	119.38	-63.4	209.75	197	7950	1.97
n,n-dimethylformamide	42	68-12-2	172	73.1	-60.15	213	3.87	1000000	-1.01
bromomethane	43	74-83-9	288	94.94	-93.45	179.7	1620	15200	1.19
chloromethane	44	74-87-3	96	50.49	-97.25	175.9	4300	5320	0.91
chloroethane	45	75-00-3	74	64.52	-138.55	134.6	1010	6710	1.43
chloroethylene	46	75-01-4	77	62.5	-153.69	119.46	2980	8800	1.62
dichloromethane	47	75-09-2	145	84.93	-94.78	178.37	435	13000	1.25
carbon disulfide	48	75-15-0	241	76.14	-111.35	161.8	359	1180	1.94
vinylidenechloride	49	75-35-4	117	96.94	-122.42	150.73	600	2420	2.13
trichloroacetaldehyde	50	75-87-6	208	147.39	-57.5	215.65	50	30000	0.99

Table 3. (continued)

Compound Name	No	CAS No	PRTR No	Molecular weight (g/mol)	Fusion point (°C)	Boiling point (°C)	Vapor pressure (mmHg)	Solubility (mg/L)	Octanol-water partition coefficient (logPow)
2,2'-azobisisobutyronitrile	51	78-67-1	13	164.21	101.5	374.65	0.0067	350	1.1
isoprene	52	78-79-5	28	68.12	-145.9	127.25	550	642	2.42
1,2-dichloropropane	53	78-87-5	135	112.99	-100.05	173.1	53.3	2800	1.98
1,1,2-trichloroethane	54	79-00-5	210	133.41	-36.35	236.8	23	4590	1.89
2,5-dichloronitrobenzene	55	89-61-2	128	192	56	329.15	0.00571	14	3.09
o-dichlorobenzene	56	95-50-1	139	147	-16.5	256.65	1.36	156	3.43
o-chloroaniline	57	95-51-2	71	127.57	-14	259.15	0.204	8160	1.9
o-toluidine	58	95-53-4	225	107.16	-23.45	249.7	0.26	16600	1.32
2,4-toluenediamine	59	95-80-7	228	122.17	99.15	372.3	0.00017	74800	0.14
2-imidazolidinethione	60	96-45-7	32	102.16	203.5	476.65	2.02E-06	20000	-0.66
dinitrochlorobenzene	61	97-00-7	83	202.55	52.2	325.35	8.49E-05	8	2.17
nitrobenzene	62	98-95-3	240	123.11	5.8	278.95	0.245	2090	1.85

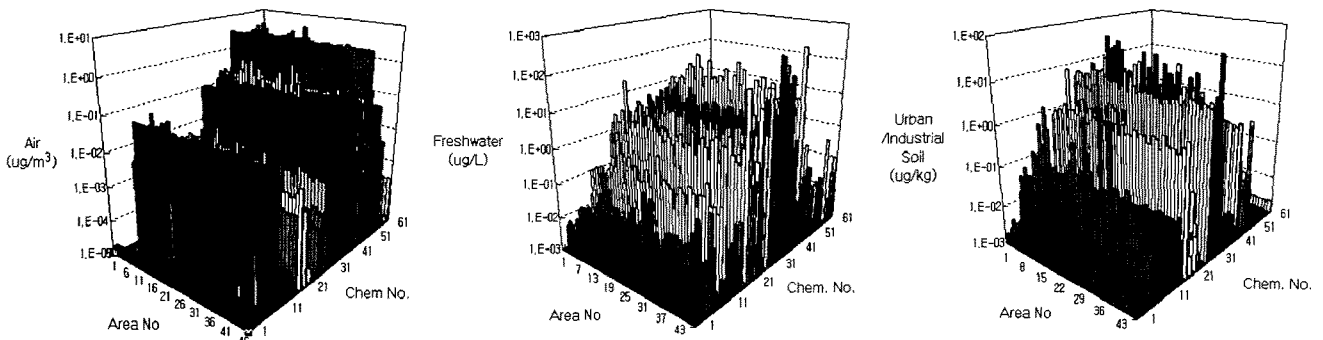


Fig. 1. Simulation result of chemicals concentration in 47 Prefectures of Japan.

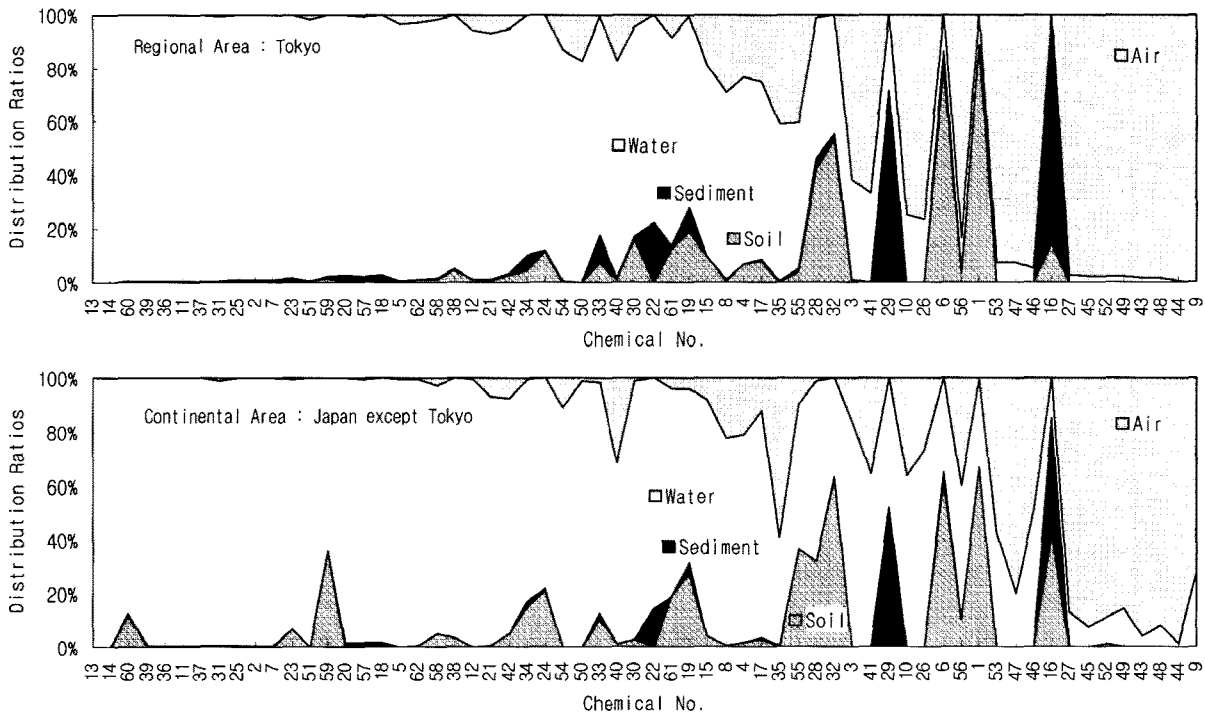


Fig. 2. Chemicals distribution ratios in each compartment (%).

가 도출될 것으로 사료된다. 화학물질 관리의 우선순위 결정이나 화학물질에 대한 데이터가 빈약한 상태에서 행해지는 초기 리스

크 평가에 많이 이용되는 다매체 모델의 특성과 여러 물질, 여러 매체, 자료의 존재상황이 다양한 경우를 동시에 개략적으로 평가

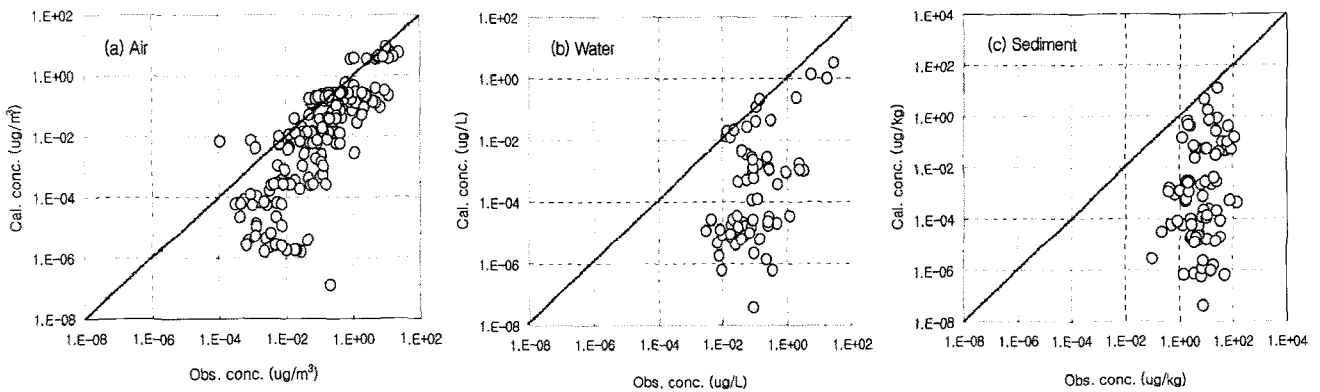


Fig. 3. Comparison of the observed and simulated chemicals concentration.

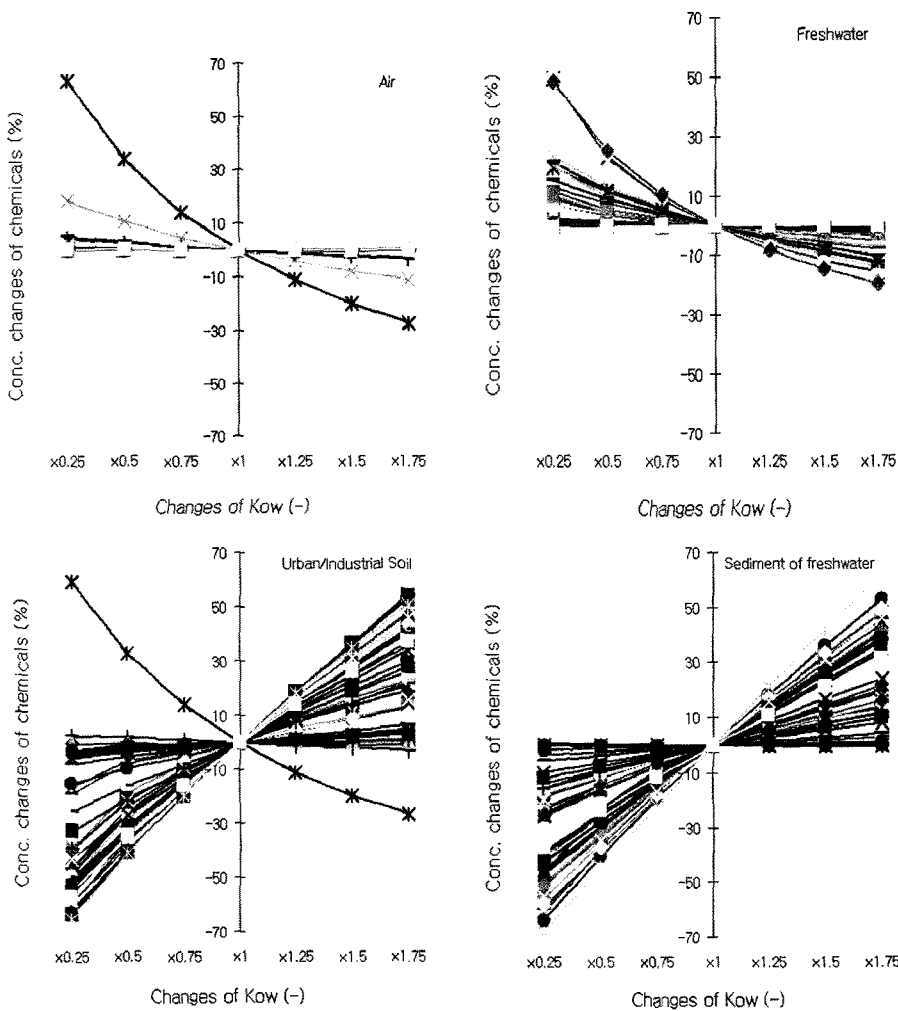


Fig. 4. Sensitivity analysis of chemical concentrations by change of values of Kow (Regional area; Tokyo).

하여 화학물질 관리순위선정 등의 과정에 기초자료를 제공하기 위한 본 연구의 목적을 감안하면 모델 결과치는 적용 가능한 것으로 판단된다.

3.3 민감도 분석

모델에 적용된 계수중 그 중요도가 클 것으로 판단되는 옥탄올-물 분배계수와 분해계수에 대하여 민감도 분석을 실시하였다.

Regional area 및 Continental area에 대하여 대기, 옥수역 물환경, 도시산업용지의 토양, 옥수역의 저질에서의 화학물질농도 변화를 살펴보았다(Fig. 4~Fig. 7).

옥탄올-물 분배계수에 따른 환경매체중의 화학물질 농도변화는 도시산업용지의 토양 및 담수의 저질에서 상대적으로 크게 나타났으며, 대기와 담수에서는 상대적으로 작게 나타났다. 이는 옥탄올-물 분배계수에 영향을 미치는 유기물 존재량의 차이에 기인한

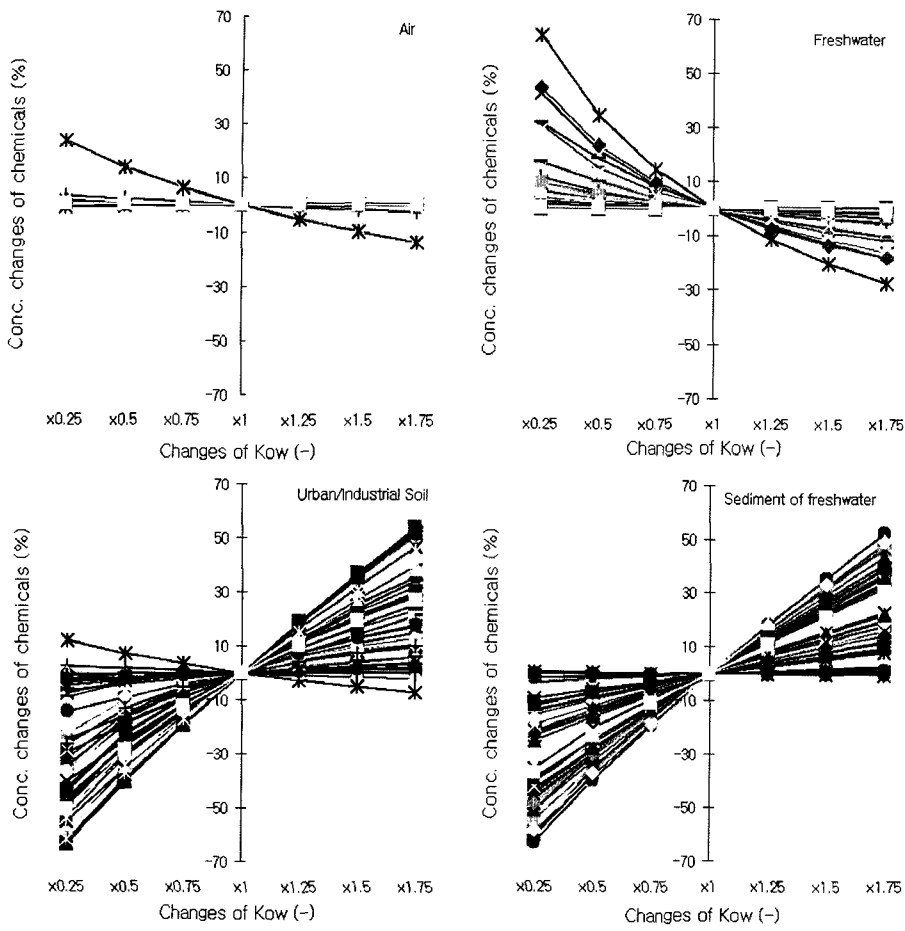


Fig. 5. Sensitivity analysis of chemical concentrations by change of values of Kow (Continental area; Japan except Tokyo)

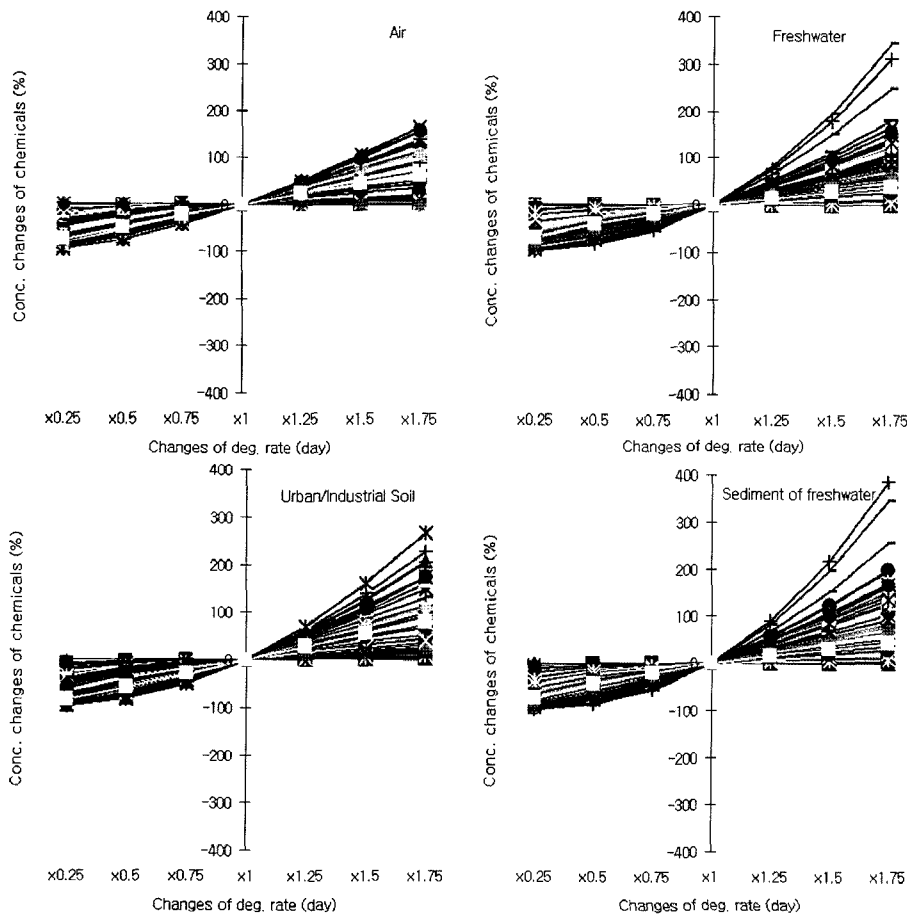


Fig. 6. Sensitivity analysis of chemical concentrations by change of values of degradation rate (Regional area; Tokyo).

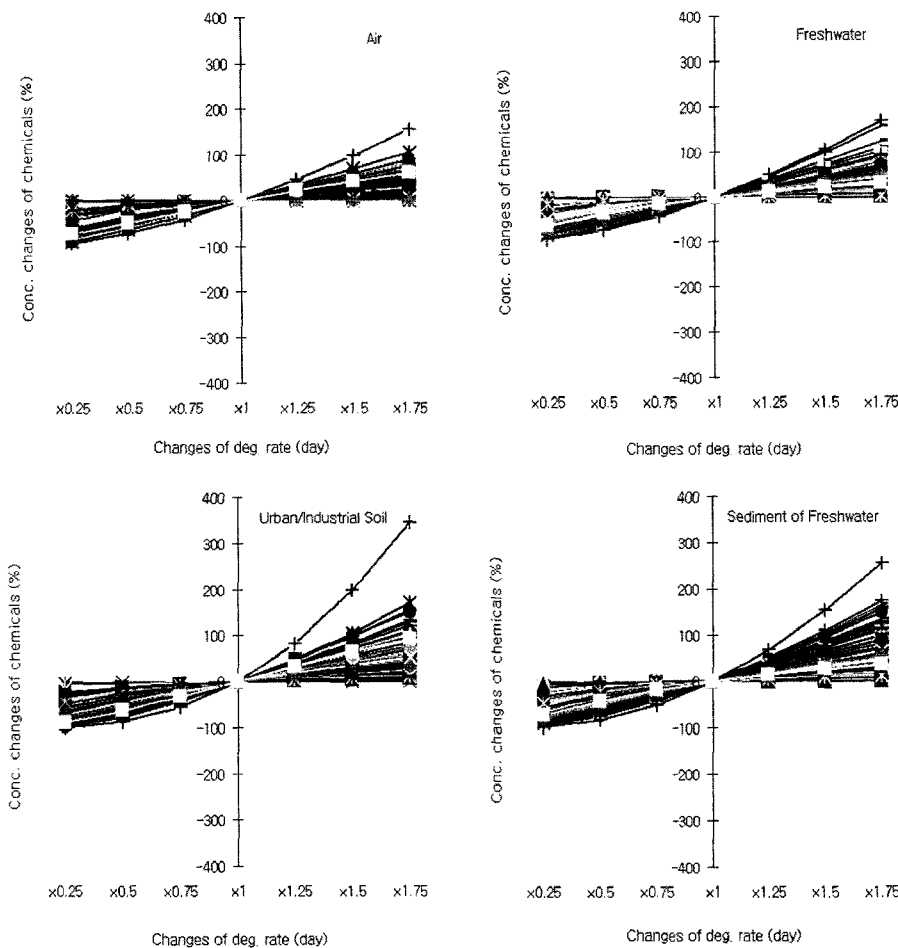


Fig. 7. Sensitivity analysis of chemical concentrations by change of values of degradation rate (Continental area; Japan except Tokyo).

것으로 판단된다. Regional area 및 Continental area에 따른 분포 형태는 대기의 경우를 제외하고는 거의 유사한 형태를 나타내었다.

분해계수에 의한 환경매체중의 화학물질 농도변화는 Regional area의 경우 육수역 물환경 및 도시산업용지의 토양, 육수역의 저질에서의 변화폭이 비슷하게 나타났으며 대기의 경우는 상대적으로 작게 나타났다. Continental area의 경우는 Regional area 보다는 변동폭이 다소 작게 나타났다.

전체적으로는 옥탄올-물 분배계수보다 분해계수에 의한 환경매체중 화학물질의 농도 변화폭이 큰 것으로 나타났다.

4. 결 론

환경오염을 통해 인간의 건강이나 생태계에 좋지 않은 영향을 미칠 우려가 있는 화학물질의 효율적인 관리를 위하여, 다매체환경모델을 사용하여 환경매체중 화학물질의 잔류가능성을 평가하고 민감도 분석을 행하였다. 효율적인 모델링 수행을 위하여 화학물질의 물성 데이터베이스 및 지역 개황 데이터베이스 등이 연계되어, 수십 또는 수백종의 화학물질을 동시에 시뮬레이션 가능하도록 개발된 MUSEM(MULTimedia Simplebox-systems Environmental Model)을 적용하였다.

MUSEM을 이용하여 62종의 화학물질에 대하여 일본 47개 지

역의 환경매체중 농도예측을 실시하고, 추정된 화학물질 농도는 실측치와 비교 분석하였으며, 민감도 분석을 실시하여 모델링결과 의 타당성을 검토하였다. MUSEM의 예측결과, 동경지역에 있어서 각 매체별 잔류량 분포를 살펴보면, 한 매체에 50%이상 다량 분포하는 물질은 대기의 경우 1,3-butadiene(99.8%) 등 16종, 물 환경의 경우 piperazine(99.8%) 등 41종에 달했다. 토양의 경우는 p-chloronitrobenzene(88.5%) 등의 3종이 50%이상 다량 분포하였고, 저질의 경우는 tri-n-butyl phosphate가 21.9%로 가장 높은 분포비를 나타내는 것으로 예측되었다. 이러한 62종의 물질에 대한 매체별 잔류비(%)는 수역에 대부분의 물질이 분포하는 것으로 예측되었다.

모델에 적용된 계수중 그 중요도가 클 것으로 판단되는 옥탄올-물 분배계수와 분해계수에 대하여 민감도 분석을 실시하였다. 옥탄올-물 분배계수에 따른 환경매체중의 화학물질 농도변화는 도시산업용지의 토양 및 담수의 저질에서 상대적으로 크게 나타났으며, 대기와 담수에서는 상대적으로 작게 나타났다. 분해계수에 의한 환경매체중의 화학물질 농도변화는 Regional area의 경우 육수역 물환경 및 도시산업용지의 토양, 육수역의 저질에서의 변화폭이 비슷하게 나타났으며 대기의 경우는 상대적으로 작게 나타났다. Continental area의 경우는 Regional area 보다는 변동폭이 다소 작게 나타났다. 전체적으로는 옥탄올-물 분배계수보다 분해

계수에 의한 환경매체중 화학물질의 농도 변화폭이 큰 것으로 나타났다.

MUSEM을 이용한 노출량 산정결과는 여러 화학물질에 대한 환경매체중 농도의 산정, 비교평가가 필요한 화학물질 관리의 우선 순위 결정이나 화학물질에 대한 데이터가 빈약한 상태에서 행해지는 초기 리스크 평가 및 해양내 존재할 가능성이 큰 신규 화학물질의 관리에 유용할 것으로 사료된다.

사 사

본 연구의 많은 부분이 日本環境省의 지원과 日本國立環境研究所 Dr. H. Shiraishi님의 도움으로 수행되었으며, 이에 감사드립니다.

참고문헌

- [1] Cahill, T.M., Cousins, I. and Mackay, D., 2003, General fugacity based model to predict the environmental fate of multiple chemical species. *Environmental Toxicology and Chemistry* 22(3), 483-493.
- [2] California EPA, 1993, CalTOX, a multimedia total-exposure model for hazardous-waste sites. The Office of Scientific Affairs, Department of Toxic Substance Control, Sacramento, CA, USA.
- [3] Environment Agency of Japan, 1993, Comparisons of global environmental fate models applicability of global models to Japanese environment. Prepared to OECD Phase 1 SIDS Initial Assessment Meeting.
- [4] Polder, M.D., Hulzebos, E.M. and Jager D.T., 1998, Bioconcentration of gaseous organic chemicals in plant leaves: comparison of experimental data with model predictions. *Environmental Toxicology and Chemistry* 17(5), 962-968.
- [5] Roh, K.J., Kim, D.M., Cho, H.S., Shiraishi, H., Lee, S.M. and Park, C.K., 2004a, 10, Ranking of chemical substances for risk assessment using a multi-media environmental model and partial order theory. 4th Conference of the International Society for Ecological Informatics (ISEI4).
- [6] Roh, K.J., Hikihara, Y., Kim, D.M. and Shiraishi, H., 2004b, 12. Fate of chemical substances using a multi-media environmental model. The 7th Annual Meeting of Japan Society of Endocrine Disrupters Research.
- [7] Shiraishi, H. and Roh, K. J., 2004, Research on modeling for the fate of endocrine disruptors, 4th Japan-Korea Cooperative Joint Symposium on Endocrine Disrupting Chemicals.
- [8] Snyder, E.M., Snyder, S.A., Giesy, J.P., Blonde, S.A., Hurlburt, G.K., Summer, C.L., Mitchell, R.R. and Bush, D.M., 2000, SCRAM: A scoring and ranking system for persistent, bioaccumulative, and toxic substances for the north american great lakes. *Environmental Science and Pollution Research* 7, 51-61.
- [9] Swanson, M.B., Davis, G.A., Kincaid, L.E., Schultz, T.W., Bartness, J.E., Jones, S.L. and George E.L., 1997, A screening method for ranking and scoring chemicals by potential human health and environmental impacts. *Environmental Toxicology and Chemistry* 16(2), 372-383.
- [10] 김미경, 배희경, 송상환, 구현주, 김현미, 최광수, 전성환, 이문순, 2005, EQC 모델을 이용한 벤조일 퍼록사이드의 다매체 환경거동 예측. *대한환경공학회지* 27(10), 1090-1098.
- [11] 박광식, 2003, EQC모델을 이용한 Benzoic acid의 환경분포 예측. *한국환경독성학회지* 18(1), 63-67.
- [12] 차순우, 주철균, 박현수, 박세진, 김필제, 이상목, 최경희, 이종협, 2003, 환경관리대상 오염물질 우선순위 선정방법 및 도시와 산단지역의 주요 오염물질 선정. *한국화학공학* 41(3), 357-367.
- [13] 환경부, 2005, 환경백서. pp. 720.
- [14] 日本水道産業新聞社, 2002, 9. 下水道年鑑2003年版, pp. 1840.
- [15] 日本環境省, 2003, P R T R特定化學物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律第8条第4項及び第9条第2項に基づく公表-ファイル記録データ(全データ)<排出年度:平成13年度>.
- [16] 日本環境省・経済産業省, 2003, P R T R特定化學物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律第8条第4項及び第9条第2項に基づく公表-届出排出量・移動量及び届出外排出量の集計結果<排出年度:平成13年度>.
- [17] 日本総務省統計局, 統計研修所, 2002, 日本統計年鑑(第52回(2003)). 日本統計協會, pp. 920.

2007년 8월 17일 원고접수

2007년 11월 6일 수정본 채택