

# Miljö & Dataanalys

Miljö & Dataanalys,  
Årgång 1, Nummer 1

21 januari, 2002

*Välkommen till det första numret av nyhetsbrevet Miljö & Dataanalys!*

Här återkommer jag regelbundet med korta nyheter och notiser inom:

- Miljö kemi
- Riskbedömning
- Dataanalys
- Försöksplanering och optimering

Med vänliga hälsningar



*Insidorna i detta nummer:*

Stockholmskonventionen	2
Optimera driften och minska utsläppen	2
Bakterie bryter ner PCB	2
EU:s dioxinstrategi	3
Utsläppsmätningar och variationsmönster	3
Surftips	4

## Samband mellan struktur och miljöegenskaper för PCB

**Miljöegenskaper för 209 st PCB kongener har beräknats med en modell.**

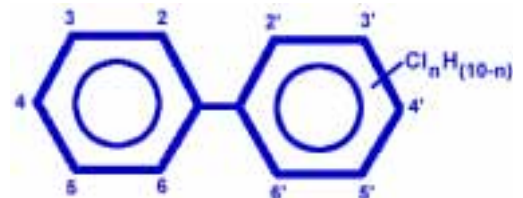
PCB (polyklorerade bifenyler) består av 209 olika kongener, med varierande antal klor och olika substitutionsmönster. Vissa kongener, de s.k. plana PCB, är mer toxiska (giftiga) än de övriga och liknar på många sätt dioxiner.

De fysikaliska egenskaperna styr fördelning och transport i miljön. Exempel på sådana egenskaper är vattenlöslighet och ångtryck. Generellt sett så minskar både vattenlöslighet och ångtryck med ett ökat antal kloratomer i molekylen, men bindningsmönstret för kloratomerna har också betydelse.

De fysikaliska egenskaperna har bestämts experimentellt för 20-60% av kongenerna. För de övriga måste vi än så länge lita på beräkningar. En väg som har visat sig framgångsrik i andra sammanhang är att skapa teoretiska deskriptorer för molekylerna och sedan korrelera dessa med experimentella data. Ett problem är dock att mätresultaten kan skilja sig mellan olika laboratorier/undersökare och att det naturligtvis även finns mätfel.

Robusta beräkningsmetoder har störst sannolikhet att ge stabila och korrekta förutsägelser. Nyligen har beräkningsresultat redovisats för samtliga 209 kongener för vattenlöslighet, ångtryck, Henrys konstant och log P (mätt på fettlöslighet).

Beräkningarna utfördes med en robust metod och det visade sig då även möjligt att avslöja skrivfel i sammanställningar av mätdata. Hela undersökningen, inklusive alla mätdata och beräkningsresultat, finns publicerad i Internet Journal of Chemistry och är tillgängliga på Internet (<http://www.tomasoberg.com/qspr/paper.html>).



PCB-molekylen kan binda kloratomerna i 10 olika positioner, vilket ger totalt 209 olika substitutionsmöjligheter.

## Benso[a]pyren-ekvivalenter

**Giftigheten för olika PAH-föreningar kan jämföras med ekvivalensfaktorer.**

Benso(a)pyren (BaP) används ofta som referens- eller indikatorsubstans när man diskuterar cancer risker från polycykliska aromatiska kolväten (PAH). Ett annat tillvägagångssätt som har tagits upp inom bl.a. det amerikanska naturvårdsverket är att använda ekvivalensfaktorer (TEF) som redan är etablerat för dioxiner och PCB.

De s.k. BaP-ekvivalenterna är ett viktat medelvärde som motsvarar den halt av benso[a]pyren som förväntas ha en likartad effekt. Ekvivalensfaktorerna har alltså fördelen att vi får ett siffervärde som innefattar flera av de PAH-föreningar som vi vet är cancer-

framkallande. Ekvivalensfaktorerna skiljer sig i viss utsträckning mellan olika författare och rapporter. I tabellen redovisar jag ekvivalensfaktorer för 7 st PAH där uppgifterna är relativt samstämmiga.

PAH-förening	Ekv-faktor
Benso[a]antracen	0.1
Benso[a]pyren	1
Benso[b]fluoranten	0.1
Benso[k]fluoranten	0.1
Chrysen	0.01
Dibenso[a,h]antracen	1
Indeno[1,2,3-cd]pyren	0.1

# Stockholmskonventionen

**Tolv av de allra miljöfarligaste kemikalierna förbjuds eller begränsas. Konventionen omfattar även oavsiktlig bildning av PCB, dioxiner, dibensofuraner och hexaklorbensen.**

Vid en konferens i Stockholm i maj förra året undertecknades Stockholmskonventionen om utfasning av långlivade organiska miljögifter (s.k. POPs).

I den första omgång omfattar beslutet tolv ämnesgrupper varav nio är bekämpningsmedel (aldrin, klordan, DDT, dieldrin, endrin, heptaklor, hexaklorbensen, mirex och toxafen.). Inget av dessa är tillåtet att använda i Sverige. De övriga tre ämnesgrupperna är PCB samt klorerade dioxiner och dibensofuraner.

Bilagan C till konventionen har rubriken "Unintentional production" och fokuserar just

på oavsiktlig bildning av PCB, dioxiner, dibensofuraner och hexaklorbensen. De källor som räknas upp är dels alla termiska processer där klor och organiskt material ingår, dels ett antal industrispecifika produktionsprocesser.

Konventionstexten listar ett antal försiktighetsåtgärder som bör övervägas, bl.a. substitution av material som kan ge upphov till dessa miljögifter, en avfallshantering som förhindrar okontrollerad förbränning och bränder på avfallsdeponier samt tillämpning av bästa tillgängliga teknik (BAT).

Mer information om konventionen och den fortsatta utvecklingen finns på UNEP:s webbplats ([www.chem.unep.ch/pops](http://www.chem.unep.ch/pops)).



Avvecklingen av långlivade organiska miljögifter - en internationell utmaning.

## Optimera driften och minska utsläppen

**Kombinationen av processkunskap och försöksplanering ger snabba resultat.**

Driftoptimering är en kostnadseffektiv väg att förbättra produktionen och minska miljöpåverkan. Att vi dessutom kan behöva rena utsläppen hindrar inte att det första steget bör vara optimering. Processkunskapen är förstas grunden, men vilka arbetsmetoder står till buds?

Tekniska processer är ofta väl kontrollerade inom snäva variationsintervall. Det minskar möjligheterna att få värdefull information ur gamla mätdata. Istället genomförs nya prov där driftsbetingelserna ändras systematiskt enligt ett schema, en s.k. statistisk försöksplan.

De klassiska metoderna; "trial-and-error" respektive "en-variabel-i-taget" är inte särskilt effektiva. Det förstnämnda angreppssättet är tidsödande. Finns det samverkans effekter så hittar

man inte optimum genom att variera en variabel åt gången. Ändra allt på en gång, men med systematik, är vägen till framgång.

Statistisk försöksplanering har använts med framgång allt sedan 1950-talet. Idag kan vi med datorns hjälp anpassa och optimera provplanerna till i stort sett varje process och driftssituation. Hur stora förbättringar kan då uppnås?

Ett sätt att få grepp på förbättringsmöjligheterna är att studera hur stora de normala variationerna är. Att lägga sig i den bästa fjärdedelen av variationsintervallet är sällan någon omöjlig uppgift. En annan möjlighet är att granska de resultat som kollegor och konkurrenter uppnår och även här är bästa fjärdedelen (kvartilen) det som bör gälla.

Referenser och olika tillämpningsexempel finns på [www.tomasoberg.com](http://www.tomasoberg.com)

*"Statistisk försöksplanering har använts med framgång allt sedan 1950-talet. Idag kan vi med datorns hjälp anpassa och optimera provplanerna till i stort sett varje process och driftssituation."*

## Bakterie bryter ner PCB

**Den "PCB-ätande" bakterien kan användas både för att utveckla saneringsmetoder och mätmetodik.**

Amerikanska forskare rapporterar att de har lyckats identifiera en bakterie som bryter ner polyklorerade bifenyl (PCB) anaerobt.

*"This first identification of a PCB-dechlorinating anaerobic (without oxygen) bacterium is important for bioremediation efforts and for developing molecular probes to monitor PCB degrading where they are found,"* säger Kevin Sowers, research microbiologist vid

University of Maryland.

Forskarna har kunnat koppla dekloreringen av PCB direkt till bakteriens tillväxt. Den verkar alltså leva av PCB kongenen ifråga (2,3,5,6-tetraklorobifenyl).

### Referens:

Cutter, L.A., Watts, J.E.M, Sowers, K.R., May, H.D. (2001) *Identification of a microorganism that links its growth to the reductive dechlorination of 2,3,5,6-chlorobiphenyl*. Environmental Microbiology, 3(11):699



Den PCB-ätande bakterien hittades med hjälp av metodik för snabb screening av DNA.

## EU: s di oxin strategi

**En strategi för att reducera dioxinhalterna i miljön antogs av kommissionen den 24 oktober 2001 och har formulerats som ett "meddelande" till parlamentet.**

Meddelandet inleds med en allmän problem-beskrivning och det kan noteras att man fastslår att giftigheten hittills har underskattats och att intaget via födan är för stort. Vidare presenteras hittillsvarande åtgärder (direktivet om avfallsförbränning, Seveso-direktivet, PCB-förbudet, osv.). Den övergripande målsättningen är att minska intaget via födan genom att minska halterna i näringskedjorna/miljön, genom att undvika nya tillskott och att hantera "gamla synder".

EU:s dioxinstrategi skiljer på kortsiktiga (5 års perspektiv) och långsiktiga åtgärder. I det korta perspektivet vill man satsa mer på identifiering av källor och här pekar man på olika industriella och icke-industriella källor. Ett annat kortsiktigt mål är att riskbedöma icke-dioxinlika PCB och att utveckla förenklad mätmetodik.

Utsläppsbegränsningar är naturligtvis också ett kortsiktigt mål för EU-kommissionen. Här är fokus på informationsspridning kring "bästa tillgängliga teknik" (BAT) och arbetet koordineras av IPPC (<http://eippcb.jrc.es>) i Sevilla. För många verksamheter finns redan BAT-dokument eller så är de under utarbetande.

Ett ytterligare kortsiktigt mål är att hantera dioxin och PCB som redan finns i omlopp, exempelvis i lager, avfallsdeponier och förorenad mark. Forskningsbehov tas även upp liksom hur allmänheten ska informeras på ett vederhäftigt sätt.

Målsättningarna på längre sikt är delvis likartade, men här handlar det mer om insatser för miljöövervakning (nivåer och trender) och om hur nivåerna av dioxiner och PCB ska minskas i livsmedel och djurfoder.

Hela texten finns tillgänglig på EU:s hemsida ([http://europa.eu.int/eur-lex/sv/com/pdf/2001/com2001\\_0593sv01.pdf](http://europa.eu.int/eur-lex/sv/com/pdf/2001/com2001_0593sv01.pdf)).



EU vill minska intaget via födan genom att hantera "gamla synder" och undvika nya tillskott, bl.a. vill man satsa mer på identifiering av källor.

## Utsläppsmätningar och variabilitetsmönster

**Variationen av utsläppsmängderna har stor betydelse både för hur ett villkor bör utformas och hur utsläppet kan mätas.**

I tillstånd enligt miljöbalken ingår ofta villkor om tillåtna utsläpp. Utsläppsmätningar är därför en viktig del av egenkontroll och tillsyn. Mot den bakgrunden är det lite förvånande att statistiska metoder för att beskriva och utvärdera mätresultat inte har fått spela en större roll i det praktiska miljöarbetet. Om ett mätvärde är högt, lågt, tillförlitligt, representativt, osv. är ju av synnerligen stor betydelse för utvärderingen.

Att kartlägga variationsmönstret för ett utsläpp är ett första steg, både när man ska ta fram underlag för och senare kontrollera ett miljövillkor. *Det gäller att tänka efter före!*

Enstaka prov och enskilda besiktningssmätningar ger ofullständiga underlag för att föreslå mängdvillkor över tiden eller för att kontrollera dessa. Följaktligen bör man undvika att använda villkorsparametrar som är svåra och/eller dyra att mäta. Kontinuerlig mätning är förstås det man alltid vill sträva efter.

Variationsmönstret i ett utsläpp beror på variationer i produktion och reningsutrustningarnas funktion. Många naturliga förlopp följer en symmetrisk s.k. normalfördelning. Det vanliga aritmetiska medelvärdet är då en bra angivelse av mittpunkten och standardavvikelsen beskriver spridningen.

I miljösammanhang är det dock minst lika

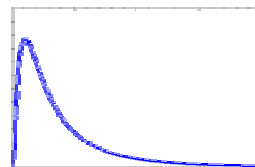
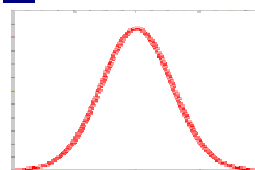
vanligt med en större spridning uppåt än nedåt. En orsak är att många variabler har en nedre gräns, utsläppet kan inte vara mindre än "0". En sådan skev fördelning kan ofta omvandlas till en symmetrisk normalfördelning genom att logaritmera mätvärdena, och kallas då för en log-normalfördelning. Det geometriska medelvärdet eller medianen är då en bättre angivelse av mittpunkten än det vanliga aritmetiska medelvärdet. Spridningen är förstås inte heller lika stor nedåt som uppåt och därför får man beräkna ett asymmetriskt osäkerhetsintervall, eller helt enkelt redovisa max- och minvärdena.

Är ett miljövillkor uttryckt som en viss mängd per år så är beräkningsgången olika beroende på om utsläppsvariationerna är normalfördelade, log-normalfördelade pga variationer i process/utrustningar eller log-normalfördelade pga variationer i själva mätutrustningen. Där emot kan man inte bortse ifrån enstaka höga mätvärden bara för att de är höga. En stor del av årsutsläppen brukar ske under korta tidsperioder när fel inträffar i reningsutrustningarna.

### Litteratur:

Dean, R.B. (1981). *Use of Log-Normal Statistics in Environmental Monitoring* in *Chemistry in Water Reuse*, Vol. 1, (ed.) Cooper, W.J., Ann Arbor Science, pp. 245-258.

*"lite förvånande att statistiska metoder för att beskriva och utvärdera mätresultat inte har fått spela en större roll i det praktiska miljöarbetet"*



Normalfördelning och log-normalfördelning är två exempel på variationsmönster som är vanliga i miljösammanhang.



Gamla Brovägen 13  
371 60 LYCKEBY

Tel / fax: +46 455 279 70  
Mobil: +46 70 641 21 57  
E-post: info@tomasoberg.com

Mer information:  
[www.tomasoberg.com](http://www.tomasoberg.com)

## **Brett fält av problemlösning**

*Jag arbetar som konsult med rådgivning och utbildning avseende **miljökemi, riskbedömning, dataanalys och processoptimering**. I praktiken betyder det att mina uppdrag spänner över ett mycket brett fält av problemlösning, i olika typer av verksamheter.*

## **Kostnadseffektivitet och miljöhänsyn**

*Jag har varit verksam som konsult sedan början av 1980-talet. En gemensam nämnare har hela tiden varit att möta kundernas behov av kostnadseffektiva och miljömässigt goda lösningar, genom en kombination av kunskap och verktyg från flera olika fält.*

## Surftips om miljö och dataanalys

**Internet innehåller en uppsjö av värdefull information, men den är inte alltid så lätt att hitta. "Surftips" kommer tillbaks i nästa nr.**

### **TOXNET**

URL: <http://toxnet.nlm.nih.gov>  
En mycket omfattande samling av databaser kring kemiska miljö- och hälsorisker.

### **Envirofacts**

URL: <http://www.epa.gov/enviro>  
Gateway till U.S. EPA:s miljödata-baser.

### **Syracuse Research Corporation**

URL: <http://esc.syrres.com>  
Miljödata för 10000-tals organiska ämnen.

### **Air Quality Guidelines for Europe**

URL: [http://www.who.nl/aqg/txt1\\_1.htm](http://www.who.nl/aqg/txt1_1.htm)  
Riktlinjer från WHO.

### **EUR-Lex**

URL: <http://europa.eu.int/eur-lex/sv/>  
Portal till Europeiska Unionens lagstiftning.

### **Rixlex**

URL: <http://www.riksdagen.se/debatt/sfst/>  
Svensk författningssamling i fulltext, bl.a. miljölagstiftningen.

### **Applied toxicology**

URL: <http://www.link.med.ed.ac.uk/hew/tox/>  
Kursmodul på Internet från University of Edinburgh.

### **OECD Chemicals Testing**

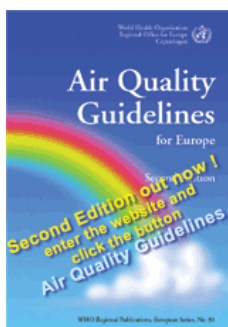
URL: <http://www1.oecd.org/ehs/test/>  
OECD Guidelines kan hämtas som PDF-filer.

### **PCB ID Home page**

URL: <http://www.epa.gov/toxteam/pcbld/>  
En sida som reder ut nomenkulturen för de olika PCB kongenerna.

### **The Statistics Homepage**

URL: <http://www.statsoft.com/textbook/stathome.html>  
Statsoft's elektroniska handbok i statistiska metoder.



WHO:s Air Quality Guidelines finns tillgängliga online.