



Title	化学物質の運命予測モデルの新たな試み
Author(s)	片谷, 教孝; 青木, 淳
Description	第5回衛生工学シンポジウム (平成9年11月6日 (木) -7日 (金) 北海道大学学術交流会館) . 2 評価・モデル . 2-1
Citation	衛生工学シンポジウム論文集, 5, 57-61
Issue Date	1997-11-01
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/7704
Type	departmental bulletin paper
File Information	5-2-1_p57-61.pdf



2-1

化学物質の運命予測モデルの新たな試み

片谷 教孝（山梨大学工学部） 青木 淳（長野日本ソフトウェア株）

1. はじめに

近年の科学技術の進歩、特にエレクトロニクス、新素材、バイオテクノロジー等のいわゆる先端産業の発展に伴い、多くの新たな化学物質が製造・使用されるようになり、従来から使用されている物質でも、その製造・使用量が急激に増加している例が少なくない。それらの化学物質の中には、発ガンなどの毒性を有するものが多いことが知られている。これらの化学物質は、正常な製造・使用の過程においてもその一部が一般環境の大気や水などの媒体中に侵入し、それらが人体や生態系に暴露されることによって有害な影響をもたらすことは、既に多数指摘されているところである。また事故が発生すれば、その侵入量・暴露量は格段に増大する可能性がある。そこで、これらの環境汚染や人体暴露を防止するための有効な対策の実施が急務となっており、その一つの段階として、それらの有害性や危険性を事前に予測評価するリスクアセスメントの概念^{1) 2)}が生まれてきた。

筆者らはこれまでに、このリスクアセスメントの概念と、その中で用いられるモデル計算手法について事例を紹介した³⁾。またその中で、平衡論に基づく予測モデルの開発について報告した⁴⁾。次いで、その準平衡論モデルについて実測値と計算値の比較、感度解析等の方法によって改良を図った結果を報告し、化学物質濃度と通常の大気汚染物質濃度や気象要素との相関についての分析結果についても、あわせて報告した⁵⁾。

本報では、モデルの問題点を解決するためにその後に行った検討の結果を報告し、あわせてモデルの輸送計算部分に新しい発想の導入を試みた結果についても報告する。

2. 予測モデルの概要

2.1 予測モデルの種類

予測モデルの手法には、大別して平衡モデルと非平衡モデルがある。非平衡モデルは、環境侵入、輸送、化学反応等の過程を示した微分方程式を解くことにより時々刻々の濃度変化を求めることができる。これに対し平衡モデルは各環境媒体毎の化学物質濃度が各媒体間で平衡に達するものと仮定し、濃度を各媒体間の平衡定数を元に計算するモデルである。

化学物質の長期暴露による悪影響について考えた場合、時々刻々の濃度を求める非平衡モデルよりも、長期にわたる平均の濃度を求める平衡モデルの方が有利と考えられる。

2.2 平衡モデルの概要

上記のように平衡モデルは各環境媒体毎の化学物質濃度が各媒体間で平衡に達するものと仮定し、濃度を各媒体間の平衡定数を元に計算するモデルである。一般に平衡モデルでは、予測の対象地域を一つの大きなボックスで扱い、対象地域全体の化学物質の平均濃度を計算するケースが多い。しかしこの手法では対象地域の濃度分布を再現することができない。

そこで本研究のモデルでは、対象地域を複数のメッシュ（1メッシュ：約1km×1km）に分割することにより、メッシュ間の物質の移流を考慮し、濃度の地域分布も示せるようにしている。

図1は各メッシュ内における化学物質の各媒体間の移動と媒体中での分解、メッシュ間の移流を表している。対象地域内の各メッシュごとにこのような平衡計算を行い、その後メッシュ相互間の移流項を計算する手順となっている。

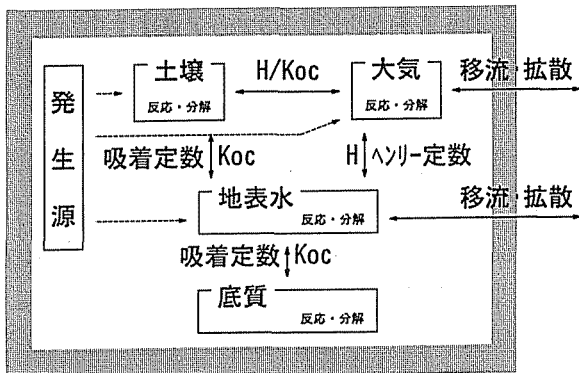


図1 各メッシュ内の物質の移動過程

3. 物質収支の確認

移流過程を考慮した場合の問題点として、物質移動が適切に計算されずに物質収支がとれなくなってしまう可能性の存在がある。対象地域全体に一樣な風速場を設定した場合には、その問題は少ないが、不連続な風速場を設定した場合には、計算の発散等の影響で収支が不整合となる可能性が大きい。そこで、最終的に平衡に達するまでの対象地域全体における化学物質の総発生量、環境中での分解量、対象地域からの流出量、環境中に残留する存在量を算出し、収支がとれているかどうかを確認した。本来、分解量、流出量、存在量の総和は発生量に等しくなるはずである。

表1、表2に示すのは、ベンゼン、トリクロロエタンについて地域分割を行った場合と行わなかった場合のシミュレーションの結果得られた、発生量に対する分解量、流出量、存在量の割合である。

これらの結果から、一樣な風速場の場合と不連続な風速場の場合とで、ベンゼン、トリクロロエタンとも、分解量、流出量、存在量の比率には変化があったが、収支の差にはほとんど変化はなく、少なくとも物質収支の面では、ある程度の不連続な風速場を適用しても問題は起こらないことが示された。

表1 ベンゼンの発生量に対する分解量、流出量、存在量、収支の差の割合(単位：%)

	一樣な風速場	不連続な風速場
分解量	0.04	0.04
流出量	26.56	31.44
存在量	72.75	67.88
収支の差	0.65	0.64

表2 トリクロロエタンの発生量に対する分解量、流出量、存在量、収支の差の割合(単位：%)

	一樣な風速場	不連続な風速場
分解量	61.62	58.10
流出量	11.87	16.49
存在量	25.53	24.47
収支の差	0.98	0.94

4. 季節代表性の検討

前報までの化学物質濃度の試算結果は、年平均の風向頻度と平均風速を用いて導き出された年平均の濃度計算値である。これに対して実測値は夏と冬にそれぞれ最大2日ずつ測定したものを平均して、便宜上年平均濃度として取り扱ったものである。

しかし風向・風速などは季節によってその様相は大きく異なってくるものであり、わずか2～4日分の実測値に対して年平均の計算値を比較するのは必ずしも妥当ではない可能性が考えられる。

そこで、風向風速データをとる際に、それぞれの実測値の測定期にあわせた風向・風速データを用いることにより、その季節の化学物質濃度を算出し、夏、冬それぞれの実測値と比較することを考えた。

表3にベンゼンの季節別の濃度計算値と、それに対応する実測値を示す。

表3 大気中のベンゼンの濃度の季節代表性の比較 (単位: ppb)

観測地点	8 月		1 月		年 間	
	実測値	計算値	実測値	計算値	実測値	計算値
A	0.74	0.45	1.89	0.60	1.31	0.49
B	1.03	0.68	2.59	0.97	1.81	0.80
C	1.07	1.13	3.45	1.14	2.26	1.07
D	0.51	0.40	2.14	0.32	1.33	0.33
E	0.50	0.11	1.77	0.08	1.14	0.09
F	0.52	0.25	1.59	0.28	1.04	0.28
G	0.75	1.24	1.97	1.15	1.36	1.14
H	0.52	0.15	1.50	0.16	1.01	0.18
相関係数	0.744		0.723		0.753	

1月、8月の風データを用いて行った計算の結果は、年間の計算結果と比較して、実測値との相関はほとんど変化がないかあるいは若干の低下が見られる。この理由としては次のように考えられる。

風データを観測した3地点についてそれぞれ8月、1月、年間の平均風速と風向頻度を比較すると、季節間の差異よりも地点間の差異の方が目立つ。つまり、少なくともここに示されている風データを見る限りでは、この対象地域では季節による風向、風速の変動は小さく、これに注目しても濃度計算値に指したる改善は見られないと考えられる。しかし季節によって大きく風の変動がある地域については、このような試計算は、また異なる結果をもたらすものと考えられる。

また、本研究では風データのみを変更する

ことで季節毎の試計算を行ったが、ベンゼンのように地表近くではほとんど分解されない物質はともかく、トリクロロエタンの場合、気温による分解量が増加する可能性があり、異なる分解速度定数で、また違った結果が得られる可能性もある。

5. ランダム輸送モデルの試み

これまで平衡モデルを用いて行ってきた計算は、全て各方位毎にその方位の風速とその他のデータを用いて平衡状態の化学物質濃度を求め、それを風向頻度によって合成したものであった。これに対し、全く別の方法で風データを与えることを試みた。

これは基本的にランダムウォークモデルの考え方に沿ったもので、8方位の風を風向頻度分布を確率分布とするようにランダムに与

表4: ランダム輸送モデルによる大気中のベンゼンの濃度 (単位: ppb)

観測地点	実測値	ケース1	ケース2	ケース3
A	1.31	3.799	2.059	2.912
B	1.81	4.381	3.899	3.895
C	2.26	2.493	3.874	3.014
D	1.33	0.761	1.306	0.806
E	1.14	0.698	1.276	2.125
F	1.04	1.868	2.795	3.730
G	1.36	2.102	4.314	3.842
H	1.01	0.638	0.244	0.171
実測との相関		0.526	0.655	0.378

表5: ランダム輸送モデルによる大気中のトリクロロエタン濃度 (単位: ppb)

観測地点	実測値	ケース1	ケース2	ケース3
A	0.82	0.046	0.036	0.041
B	0.99	0.074	0.049	0.057
C	2.45	0.128	0.105	0.157
D	0.96	0.004	0.003	0.003
E	1.38	0.014	0.057	0.031
F	0.47	0.023	0.019	0.017
G	3.33	0.528	0.563	0.585
H	4.60	0.192	0.199	0.203
実測との相関		0.680	0.677	0.686

える方法である。

ここでは表4に示すように疑似乱数発生の初期値を3通り与えて、その結果を比較した。評価の対象としたのは、大気中のベンゼンおよびトリクロロエタンの濃度計算値である。

ランダム輸送モデルの試算の結果は、両物質の間でその傾向が大きく異なるものとなった。ベンゼンは実測値と計算値の相関が低下する一方で、計算値のオーダーがこれまでの試算よりも大きくなり、実測値を越える値も出ている。これに対してトリクロロエタンはこれまでと大差ない結果となっている。

ベンゼンの計算値が高くなった原因としては、ランダムウォーク的な輸送計算では、対象地域から流出する化学物質質量が少なくなることが考えられる。その影響がトリクロロエタンで少ないのは、分解速度の違いによるものとみられる。

今回の試算結果だけでは、このランダム輸送モデルの妥当性を評価するには不十分と考えられる。他の物質や他の地域での検証計算が必要であろう。

6. バックグラウンド濃度に関する検討

これまでの試算結果において、化学物質の濃度計算値が実測値に比べて小さくなるのは、モデルの入力データやパラメータに主因があることは前報でも述べた。特にトリクロロエタンについては、発生源の把握が十分でない可能性があると考えられる。

その他の原因として、対象地域外の発生源の影響(バックグラウンド濃度)が考えられる。狭い意味のバックグラウンド濃度とは、人為的な発生源が存在しない状況においても定常的に存在する化学物質濃度のことであり、一般には自然発生源から生ずるものや、既に地球上にほぼ不変的に存在するものを言う。しかしこれは非常に微量であり、本研究においてはほとんど問題にはならない。ここで問題としているのは周辺地域の発生源の影響などによる、二次的なバックグラウンド濃度である。

バックグラウンド濃度の具体的な取り扱いの方法としては計算の初期値として与える方法や、あるいはバックグラウンドなしで得た計算結果にバックグラウンド濃度を加える方法などが考えられるが、本研究では以下のような手法を用いた。

対象地域の外側に、もう1回りメッシュを設定する。このメッシュ内の化学物質濃度を固定とし、これをバックグラウンド濃度として与える。この方法によって、周辺地域からの流入や、一旦流出した物質の再流入を平均的に取り扱うことができるものとした。

この方法を用いる場合のバックグラウンド濃度の設定については、現状では十分なデータがないため、今回は次のように3通りの仮定に基づいて試算を行った。

- ① バックグラウンド濃度=0
- ② 実際に対象地域近郊の一地点で測定された濃度(0.855ppb)をバックグラウンド濃度と仮定
- ③ バックグラウンド濃度を0とした場合の対象地域の全メッシュの濃度計算値の平均値(0.336ppb)をバックグラウンド濃度と仮定

表5はベンゼンの実測値と、3通りのバックグラウンド濃度を設定した場合のそれぞれの計算結果である。

バックグラウンド濃度を0とした場合と他の2つの濃度計算値を比較すると、いずれの場合も濃度計算値がかなり大きくなっており、実測値の濃度に近い値となっていることがわかる。実測との相関については結果がまちまちであり、改善されたとは言いが、濃度計算値が全般的に大きくなった結果、絶対値の上では実測値に近い値となった。

相関が改善されないのは、バックグラウンド濃度を一律に与えていることが原因と考えられる。すなわち、対象地域外の発生源は一樣に分布しているわけではないので、方角によって対象地域外からの化学物質の流入量は異なると考えられるが、今回の方法ではそれが反映されていないことによるとみられる。

表5 バックグラウンド濃度を考慮した場合の
大気中のベンゼンの濃度 (単位: ppb)

地点	実測値	バックグラウンド濃度		
		0	0.855	0.336
A	1.31	0.514	1.133	0.748
B	1.81	0.862	1.517	1.106
C	2.26	0.714	1.383	0.961
D	1.33	0.308	1.020	0.572
E	1.14	0.479	1.120	0.719
F	1.04	0.280	1.021	0.560
G	1.36	0.775	1.454	1.028
H	1.01	0.194	0.807	0.424
相関係数		0.726	0.728	0.726

7. おわりに

本報では、前報のモデルに対して計算結果の信頼性を高めるためのいくつかの検討の結果を示し、精度的な改善が図られることを示した。

また新たにランダム輸送モデルの概念を導入し、試計算を行った。まだ十分な妥当性の評価には至っていないが、今後の検討によって、これまでのモデルにとって代わる可能性もある。

これらの検討を進めるにあたって、最も大

きな障壁となっているのは、次の2点である。これらの状況が改善されれば、運命予測モデルの研究は一段と進歩するものと期待される。

- ① モデルに含まれる輸送・反応パラメータに関する実験的知見が乏しいこと。
- ② モデルの評価に必要な実測データが乏しいこと。

引用文献

- 1) 名雪哲夫、片谷教孝; 米国における化学物質リスクアセスメント・リスクマネジメントの実施事例、公害と対策、Vol.24、No 15、1575-1581 (1988) 及び Vol.25、No.2 162-168 (1989)
- 2) US-EPA; Santa Clara Valley Integrated Environmental Management Project - Revised Stage One Report. (1986)
- 3) 片谷教孝、古橋規尊、中杉修身; 化学物質のリスクアセスメントとモデル計算、第2回衛生工学シンポジウム論文集、51-55 (1994)
- 4) 古橋規尊、片谷教孝、中杉修身; 平衡論モデルによる有害化学物質の挙動の予測、第2回衛生工学シンポジウム論文集、56-59 (1994)
- 5) 片谷教孝、青木 淳、古橋規尊、中杉修身; 化学物質のリスクアセスメントとモデル計算(2)、第3回衛生工学シンポジウム論文集、168-173 (1995)