

目次

1. はじめに.....	2
2. 既存の水系暴露解析モデル.....	3
3. AIST SHANELのモデルの開発.....	4
3.1 水系暴露濃度の求め方.....	4
3.2 AIST-SHANELにおける主要な計算.....	5
3.2.1 流量の推定.....	6
3.2.2 排出量の推定.....	8
3.2.3 暴露濃度の推定.....	10
3.3 AIST-SHANELの構造.....	12
3.3.1 AIST-SHANELの主な操作の流れ.....	12
3.3.2 AIST-SHANELのデータの入出力構造.....	13
3.3.3 SHANELの計算結果.....	15
(1) 暴露濃度.....	15
(2) 暴露濃度の現況再現性.....	20
(3) その他の解析結果.....	22
3.3.4 Turbo-SHANELの計算結果.....	24
4. AIST SHANELの特徴.....	25
4.1 SHANELの特徴.....	25
4.2 Turbo-SHANELの特徴.....	25
4.3 AIST-SHANELの支援内容.....	25
5. 実習メニュー.....	25
参考文献.....	26
用語の説明.....	27

# 化学物質のリスク評価のための水系暴露解析ツール

## AIST SHANELの開発 -

独立行政法人 産業技術総合研究所  
化学物質リスク管理研究センター  
石川 百合子

### 1. はじめに

平成 13 年の PRTR 法の施行に伴い、事業者による化学物質のリスク評価やリスク管理の役割が重要視されるようになってきている。PRTR データの公表に伴い、面的に詳細な化学物質の排出量データが入手できるようになったことから、それらの排出量データから排出源と暴露濃度の関係を明らかにすることが急務となっている。そのため、化学物質の暴露濃度の時間的、空間的な変化を追跡できるモデルが必要とされている。

大気における化学物質のリスク評価については、AIST-ADMER<sup>1</sup>、METI-LIS<sup>2</sup>などのモデルによって、評価手法の開発が進められてきた。一方、水系においては、化学物質の暴露濃度が河川の流量や排出量だけではなく、土地利用形態や排出源、排水処理施設や下水道の普及の状況によって変化すること、また、化学物質が水に溶けやすいか土壌粒子に吸着しやすいかによって変化することなどの複合的な要因から、暴露濃度の評価手法は難しいとされてきた。既存の水系暴露濃度の推定モデルは、河川のみを対象にして、河川を線として取り扱い、推定に必要な流量や排出量のデータは、その線に沿って入力する形式のものであった。

そこで、化学物質リスク管理研究センターでは、水系における化学物質のリスク評価のための水系暴露解析モデル AIST-SHANEL（正式名称：産総研 - 水系暴露解析モデル（National institute of Advanced Industrial Science and Technology - Standardized Hydrology-based Assessment tool for chemical Exposure Load）ver.0.8 を開発した。AIST-SHANEL は、流域における暴露濃度の詳細な推定を行う SHANEL と短時間で流域全体の大まかな暴露濃度を推定する Turbo-SHANEL の 2 つの解析を行うことができるモデルである。

---

<sup>1</sup> 産総研化学物質リスク管理研究センターで開発した産総研 - 曝露・リスク評価大気拡散モデル

<sup>2</sup> 経済産業省で開発した低煙源工場拡散モデル

## 2. 既存の水系暴露解析モデル

一般に、環境中の濃度を知りたいときには、次の2つの方法のどちらかで濃度を推定する。1つは、実際に観測された環境中濃度のデータを集めて統計解析を行う方法、もう1つは、化学物質の動きのメカニズムを反映したモデルによって推定する方法である。

水系の化学物質の観測は、頻度や地点が限られており、統計解析を行うにはデータの数が少ないといえる。将来的に化学物質の観測データ数が増えれば、統計解析による暴露濃度の推定方法も確立されるであろう。一方、物質のメカニズムを反映したモデルを用いる場合、あらかじめ、水の流量と化学物質が水系に出される量を推定し、それらの値を入力情報として、暴露濃度のモデル計算を行うことになる。

化学物質を対象とした水系暴露解析モデルでは、図1に示すように、統計的モデル、メカニズムに基づく濃度予測モデルともに、物質の分配や移動、分解などを考慮する必要がある。水系の一般的な水質項目である有機汚濁を扱うモデルでは、物質の特性を考慮しなくてもよいが、化学物質のリスク評価の暴露解析モデルでは、物性の違いを反映させる必要があるため、モデル計算は複雑になる。

実際の河川を対象とした暴露解析のモデルは、いくつか公開されている。国際的に有名なモデルに、ヨーロッパの GREAT - ER、アメリカ環境保護庁の BASINS や EXAMS などがある。日本の河川の汚染物質に関するモデルには、河川、下水道、市街地などを個別に解析するモデルはあるが（國松・村岡、1989）、化学物質のリスク評価では、多様な排出源や工場の排水処理施設、下水処理場などを統合する必要があり、それらのモデルでは十分に解析できない。さらに、日本の河川は、欧米と比べて河川の勾配が急であり、距離も短く、また、人口密度が高く、排出源が密に立地しているところが多いため、流域を細かく分け、流量や排出量の分布を詳細に見る必要がある。今回開発した AIST-SHANEL は、日本の河川の特徴に適していて、排出源の情報も含んだ水系暴露解析モデルとなっている。

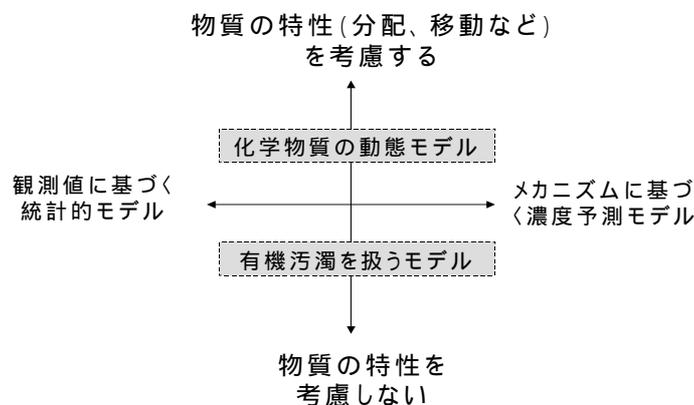


図1 水系暴露解析モデルの分類

### 3 . AIST SHANEL のモデルの開発

#### 3 . 1 水系暴露濃度の求め方

AIST-SHANEL のしくみを説明する前に、まず、水系における暴露濃度がどのように決まるのか、基本的な原理で説明しよう。

一般に、水中の物質濃度は、式(1)のように単位水量あたりの物質量で表される。

$$C = \frac{L}{Q} \quad \dots \text{式(1)}$$

$C$  : 水中の物質濃度 (  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  )     $L$  : 単位時間当たりの物質量 (  $\mu\text{g}/\text{sec}$  )

$Q$  : 単位時間当たりの水量 (  $\text{m}^3/\text{sec}$  )

さらに、水中の物質は、溶けている形のもの(溶存態)と溶けないで漂っている形(懸濁態)のものがある。水中では、溶存態の物質が他の大きな粒子、いわゆる懸濁物質と一緒にあって懸濁態の物質になったり(これを吸着という)、反対に、懸濁態の物質が水中に溶け込み、溶存態の物質になったり(これを脱着という)している。これらの割合は、物質が粒子にどれだけつきやすいかを表す分配係数から、式(2)および式(3)で求められる。

$$f_w = \frac{C_w V_w}{C_w V_w + C_s M_s} = \frac{1}{1 + K_{oc} \cdot OC \cdot SS^c} \quad \dots \text{式(2)}$$

$$C_s = K_{oc} \cdot OC_{ss} \cdot C_w, \quad M_s = SS^c \cdot V_w \quad \dots \text{式(3)}$$

$f_w$  : 溶存態化学物質の分配係数 ( - )     $C_w$  : 溶存態化学物質の濃度 (  $\mu\text{g}/\lambda$  )  
 $V_w$  : 水の容積 (  $\lambda$  )     $C_s$  : 懸濁物質(SS)中の懸濁態化学物質の濃度 (  $\mu\text{g}/\text{SS} - \mu\text{g}$  )  
 $M_s$  : 懸濁物質(SS)の質量 (  $\text{SS} - \mu\text{g}$  )     $SS^c$  : 懸濁物質(SS)の濃度 (  $\text{SS} - \mu\text{g}/\lambda$  )  
 $OC_{ss}$  : 懸濁物質(SS)の有機炭素含有率 ( - )     $K_{oc}$  : 有機炭素水分配係数 (  $\lambda/\text{kg}$  )

水系暴露濃度は、希釈や水の量と溶存態と懸濁態の割合だけではなく、他の要因にも支配されている。主な要因として、光や微生物による分解、物質が時間とともに広がっていくこと(これを拡散という)や気体、液体、固体との間の移動(これを相間移動という)が挙げられる。水系における物質の拡散や相間移動などの基礎的な概念については、合田ら(1979)や水理公式集(土木学会、1999)の参考書を見ていただきたい。

### 3.2 AIST-SHANEL における主要な計算

AIST-SHANEL は、まず、メッシュごとの流量および排出量を推定し、それらの入力情報をもとに、前述の化学物質の物質動態を考慮したモデルによって濃度を推定するものである。そのうち、主な計算ツールである SHANEL では、時間の間隔は 1 日、空間の間隔は  $1 \times 1 \text{ km}$  で計算結果が出力される。また、対象とする環境媒体は、図 2 に示すように、河川水、河川底泥（液相、固相）、土壌（気相、液相、固相）とモデル化し、河川水のみならず、河川底泥の濃度も推定することができるようになっている。計算の手順は、まず、流量と化学物質の排出量を推定し、それら 2 つの推定結果データをもとに水系暴露濃度を計算するというものである。

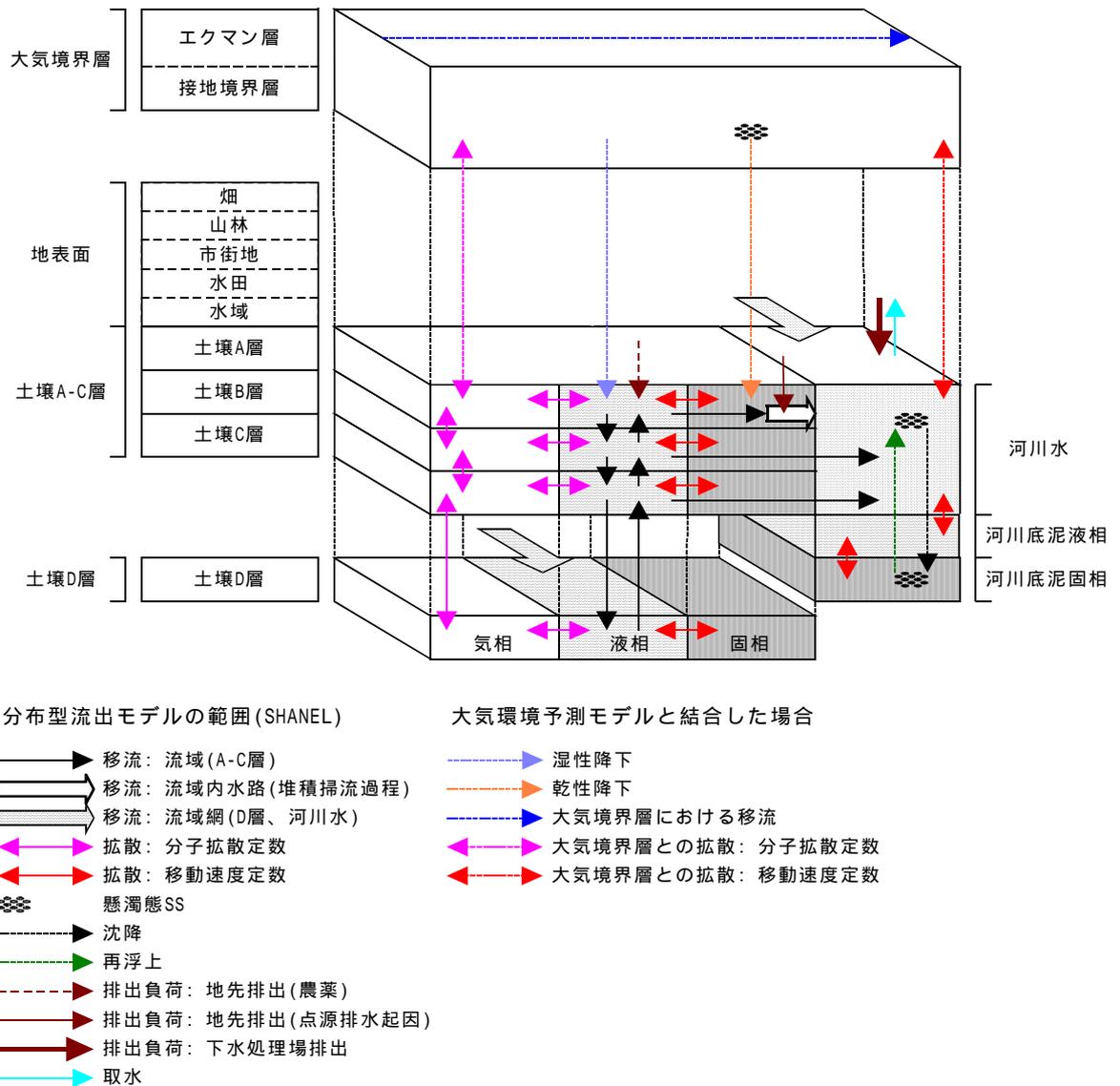


図2 SHANEL における環境媒体間の移流・拡散のモデル化

### 3.2.1 流量の推定

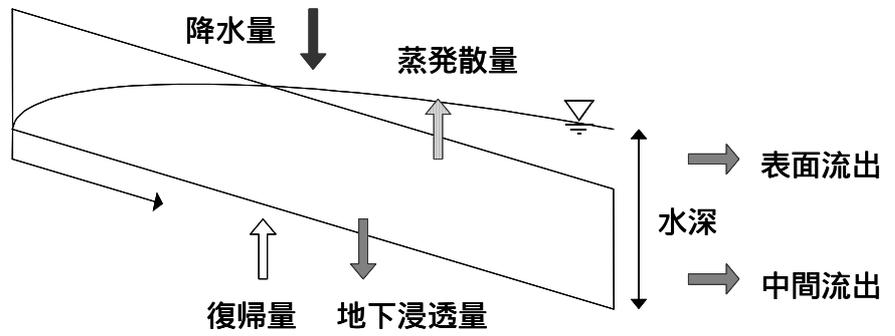
河川の流量は、日々変動している。その変動の要因は、降水量の時間的な変化、地表面の被覆状態、地理的特性、そして人為的な水利用の特性によるものである。降水を蒸発散量、地下貯留量、表面流出量に配分することを流出解析と呼び、これは水文学と呼ばれ、古くから発展した学問領域である。河川の流量は、降水から蒸発散量、地下貯留分を差し引いた量であり、その原理は、水位の差を解消するように面的に水が流動する様子を連続の式、運動方程式を連立させて解くことである。これによって河川の流量を空間的、時間的に推定することができる。連続の式は、鴨長明が「方丈記」に謳った「行く川のながれは絶えずしてしかももとの水にあらず」という水の動きの本質的な特性を示すものである。すなわち、流れている水は切れ目なく、連なっていることの意である。運動方程式とは、質量、外力の作用、そのときに生じる加速度との関係を示したもので、それを流体の特性を考慮して導き出したものである。

図3は、そのために考案された、地表面を流れる水の動きを降水量、蒸発散量、地下浸透量のバランスによって推定する方法の概要を示している。地表面とそれに近いところでは、kinematic wave(土木学会、1999)と呼ばれる方法を用いている。この方法は、水面が波の形で上流から下流に伝播して行く様子を水分子の運動のメカニズムを反映させて推定するものである。一方、土壌のより深いところでは、表面を流れる水以外を水平方向に流れる中間流と、鉛直方向に流れる地下水流に分けて考える。しかし、中間流と地下水流は、どこを流れているのか観察することが困難であるため、貯留関数法(土木学会、1999)と呼ばれる、流域を穴のあいたタンクに置き換えて、タンクの横穴からの流水を中間流、タンクの底に空いた流水を地下水流と考えて流量を推定する方法を使っている。

なお、河川では、人間活動の利水のため、工業用水、農業用水、上水道などの取水が行われている。それらの水は使用され、下水道が普及している地域では下水処理場で処理されて、放流水となって河川へ戻される。ここでは、降水量を基に推定した流量からこれらの取水を差し引いた水収支を求めている。

kinematic wave法

地表面



線形貯留モデル

土壌の深い部分

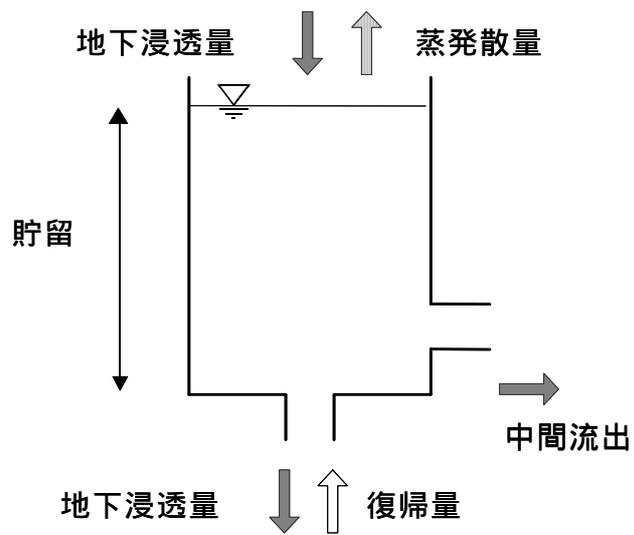


図3 流量を推定するための方法

### 3.2.2 排出量の推定

平成 13 年度から、環境汚染物質排出・移動登録制度（PRTR）が施行され、対象事業者は、排出量等を届け出ることが義務付けられるようになったことから、化学物質の排出量のデータ情報を容易に入手できるようになった。AIST-SHANEL では、メッシュごとの排出量を PRTR データに基づいて推計された届出排出量・移動量および届出外排出量の推計値を用いて、対象流域のメッシュへ配分することにより、トップダウン的に推定する。

PRTR データに基づいた排出量は、産業中分類にしたがった業種別の点源排出量（届出排出量・移動量と届出外排出量（裾切り））と、農薬、接着剤、塗料、洗浄剤などの用途別の非点源排出量（届出外排出量（非点源））に分類される。このうち、届出データについては、水域への排出量に関連するものとして、公共用水域への排出量と下水道への移動量が集計されている。一方、届出外排出量（裾切り）および届出外排出量（非点源）については、大気、土壌、水域、埋立への排出量として推計されているため、それぞれの水域への排出率を設定し、その排出率を乗じて水域への排出量を求めることになる。これらの排出量を全国値から対象流域へ割り振るために、化学物質の使用業種や使用用途ごとに、最も関係が深いと思われる割り振り指標を設定する。例えば、点源排出量のうち、機械・金属工業であれば、工業統計表（経済産業省、1954-2003）に記載されている機械工業と金属工業の製造品出荷額と化学物質の使用量が比例関係にあると考え、全国の排出量から対象流域のメッシュ別排出量に割り振ることになる。非点源排出量であれば、用途ごとに、人口または土地利用面積のうち最も適当な割り振り指標を選択し、全国の排出量から対象流域のメッシュ別排出量に割り振る。

AIST-SHANEL では、これらの PRTR データに基づいた排出量を図 4 に示す方法で、点源排出量と非点源排出量を合計し、流域における下水道普及率を考慮し、以下の 2 つの水域への排出量メッシュデータを計算する。

- ・ 地先からの排出量：下水道を経由せず、当該メッシュから排出される量。
- ・ 下水処理場からの排出量：下水道を経由して下水処理場で下水処理除去率に応じて処理された後、その残りがメッシュから排出される量

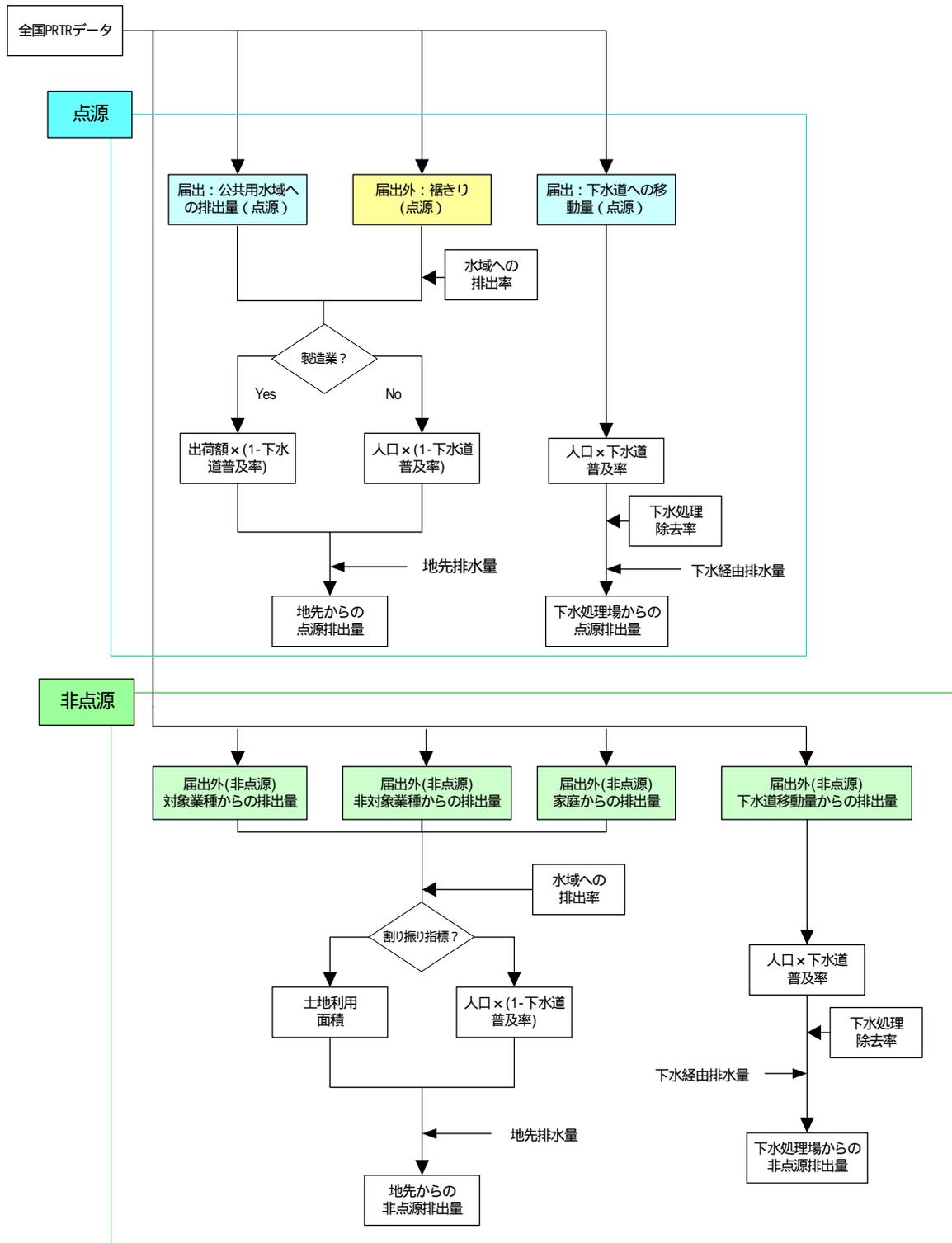


図4 PRTR データに基づいた排出量の推定方法

### 3.2.3 暴露濃度の推定

水系における化学物質の暴露濃度の推定は、次のステップからなる。

- (1) 排出地点からの流達過程を堆積・掃流モデルにより推定する。
- (2) 河道における化学物質の収支を河川水と河川底泥からなる系を対象に、図5に示すメカニズムを以下の式(4)に基づいた移流分散過程として推定する。

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + k_1 C + k_2 C + I \quad \dots \text{式(4)}$$

$$U : \text{平均流速} [L/T] \quad D : \text{分散係数} [L^2/T] \\ k_1 : \text{分解係数} [1/T] \quad k_2 : \text{媒体間移動係数} [1/T] \quad I : \text{排出量} [M/T]$$

基本的な物質動態のメカニズムについては、Mackay(2001)、Schwarzenbachら(1993)、Thomann and Mueller(1987)などが詳しく解説しているため、ここでは、SHANELで暴露濃度の計算に取り入れたメカニズムについて説明する。

移流：水の流れにともなって、物質が移動すること。

吸着：溶存態の物質が懸濁物質にくっついて、懸濁態の物質になること。

脱着：懸濁態の物質が水中に溶け込み、懸濁物質から離れて溶存態の物質になること。

分解：物質の化学構造が変化すること。分解には、微生物が物質にはたらきかけて分解していく生物分解、光があたることにより分解がおこる光分解、水中での電離平衡に基づく加水分解などがある。このような分解の現象は、河川水、河川底泥、土壌、大気のすべてにおいて起こり得るものである。

分子拡散による移動：河川水、河川底泥、土壌、大気の間で、物質が分子運動によって拡散しながら移動すること。それぞれの環境の間で物質の濃度の違いがあると、その差を小さくする方向に物質が移動する。

沈降：河川水中に漂っている懸濁物質が重力の作用によって徐々に河川底泥へと沈んでいくこと。河川底泥は、懸濁物質が沈降して堆積していったものとする。

巻き上げ：沈降にともなって河川底泥へ移行した物質が、河川水の対流などの流れによって再び河川水へと浮上すること。

湿性降下：雨に取り込まれたり、雪に吸着したりした物質が、降雨や降雪によって地上に供給されること。

乾性降下：晴天時に、大気中のガス状や粒子状の物質が重力によって地上へ落ちてくること。

排出：化学物質が河川や土壌へ排出されること。

揮発：物質が水中から大気へ移行すること。揮発の速度は物質によって異なり、物質固有の蒸気圧や水溶解度などから求められる。

また、Turbo-SHANEL では、流域全体を集中化し、河川水における溶存態の化学物質の大まかな暴露濃度を求めるため、物質動態は溶存態の分解のみを考慮して、濁水流量と低水流量の時に相当する濃度を求めている。

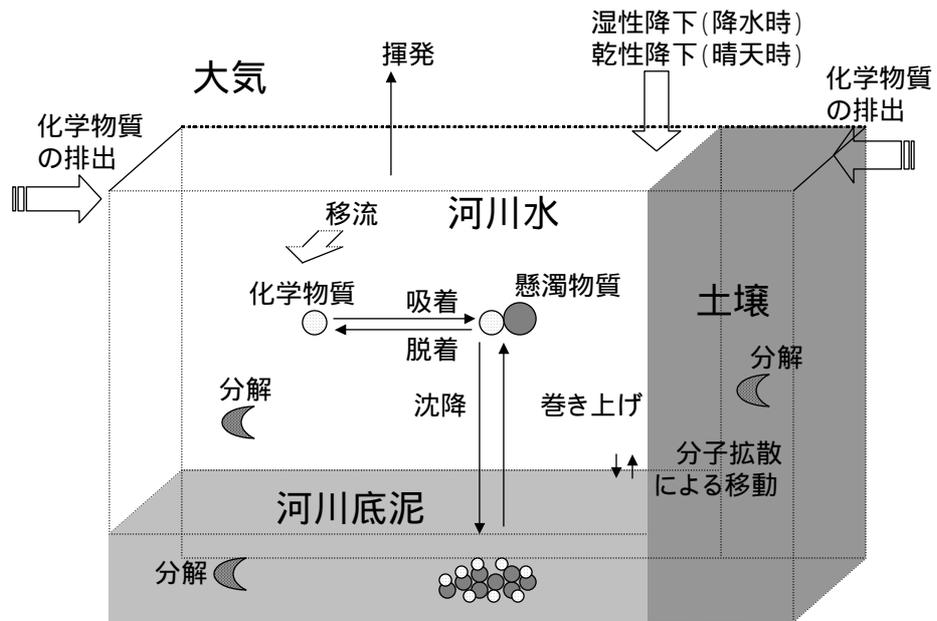


図5 暴露濃度に関するメカニズム

### 3.3 AIST-SHANELの構造

#### 3.3.1 AIST-SHANELの主な操作の流れ

前にも述べたように、AIST - SHANEL ver.0.8 は、SHANEL と Turbo-SHANEL の2つの解析ツールで構成されたものである。SHANEL は対象流域における詳細な暴露濃度を、Turbo-SHANEL は、短時間で流域全体の大まかな暴露濃度を推定するモデルである。

SHANEL では、多摩川（東京都、神奈川県）、日光川（愛知県）、石津川（大阪府）、大聖寺川（石川県）の4つの流域について、1998年から2000年の3年間の対象流域における1×1kmメッシュの日単位の暴露濃度の計算を行う。1998年から2000年までの全期間の計算を行うと、多摩川の場合で最大8時間の計算時間を要する。SHANEL における計算時間の短縮化をはかるため、図6に示すように、コールドスタート解析とホットスタート解析の機能を備えている。コールドスタート解析は、新規物質の計算の場合など初期値ゼロとして計算を行い、ホットスタート解析は、コールドスタートの解析結果の2000年12月31日の濃度を初期値として用いて計算を開始し、任意の期間の解析を行うものである。

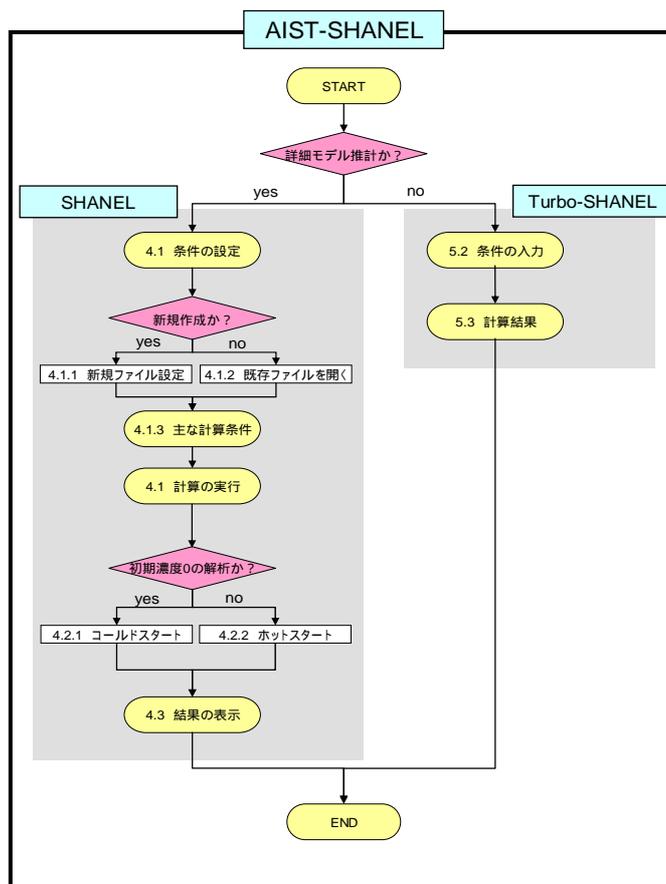


図6 AIST-SHANELの主な操作の流れ  
(番号は、操作マニュアルの章を示している。)

### 3.3.2 AIST-SHANELのデータの入出力構造

AIST-SHANEL Ver.0.8 の主要な解析ツールは、対象流域の詳細な暴露解析を行うことのできる SHANEL である。SHANEL では、3.2 で説明したようなパラメータやデータの入力が必要である。図7に SHANEL のデータの入出力構造、図8に Turbo-SHANEL のデータの入出力構造を示す。

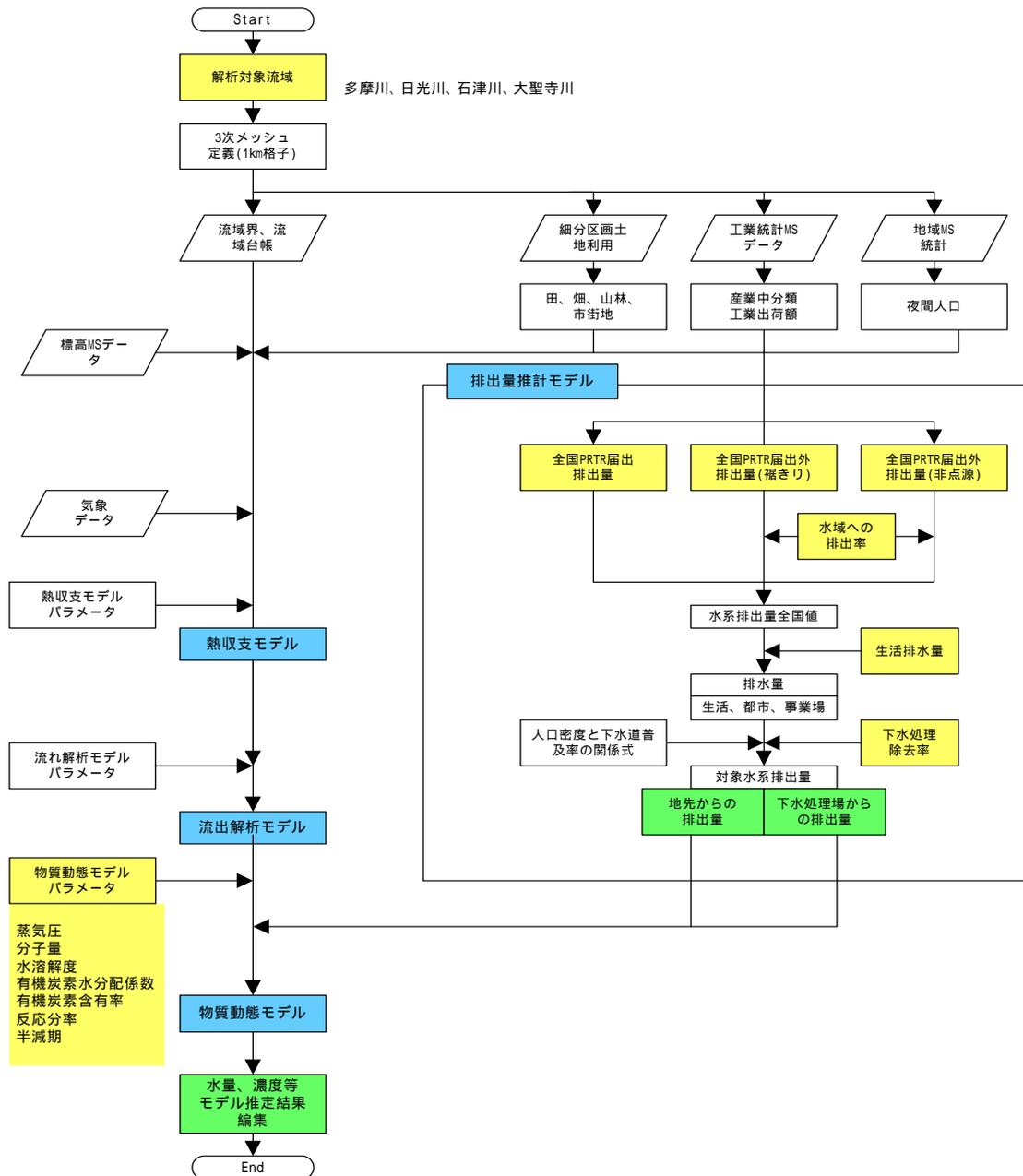


図7 SHANELのデータの入出力構造

黄色:ユーザー入力、水色:解析モジュール、緑色:出力結果

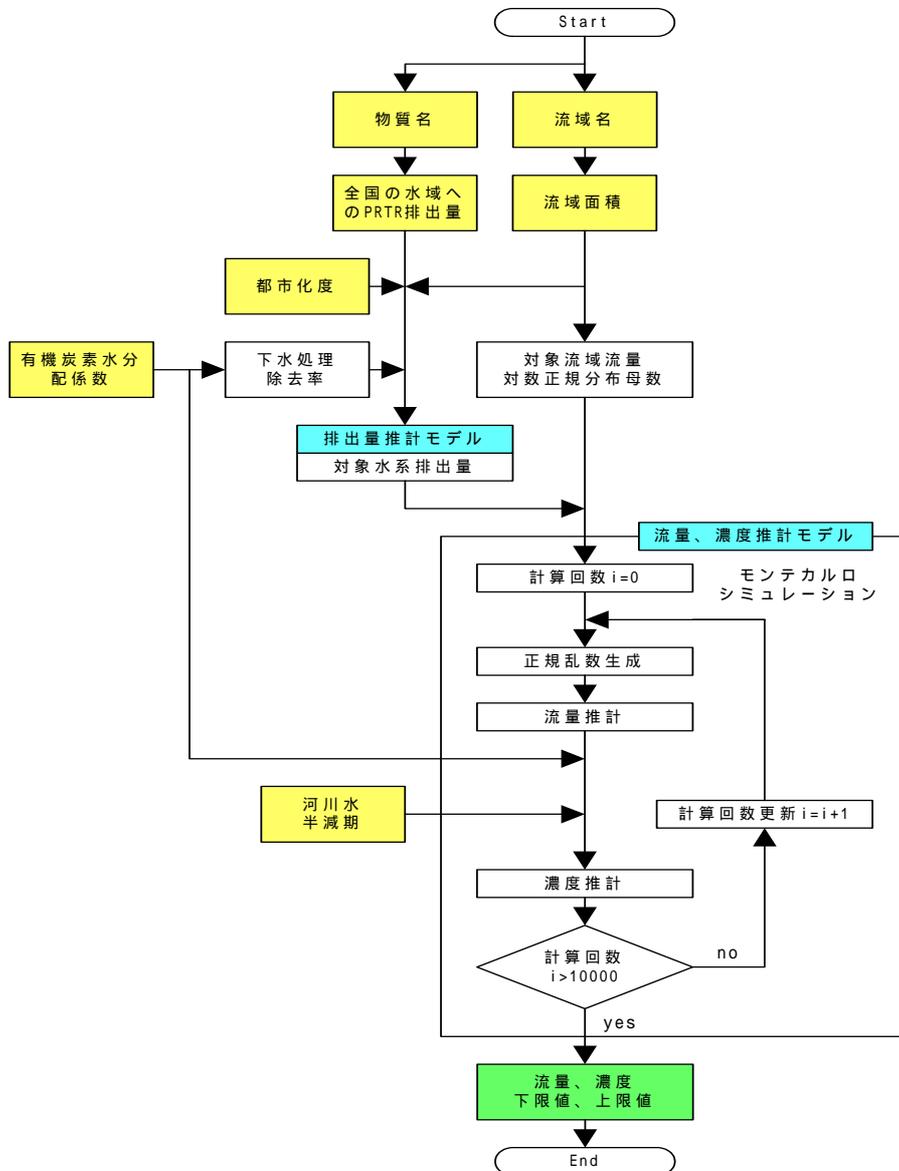


図8 Turbo SHANEL のデータの入出力構造  
 黄色:ユーザー入力、水色:解析モジュール、緑色:出力結果

### 3.3.3 SHANEL の計算結果

#### (1) 暴露濃度

それでは、実際にこのモデルを使って計算した結果を紹介しよう。ここでは、最近、魚類など生物への毒性が懸念されているノニルフェノール(NP)を取り上げて説明する。

ノニルフェノールは、工業用として生産され、その多くは、ノニルフェノールエトキシレート(NPhEO)という化合物につくり変えられて、いろいろな用途で使われる。使われたあとは、分解されてノニルフェノールとなり、最終的には二酸化炭素と水へと分解される。完全に分解されるまでの間に、中間の分解生成物として残るものも多く、ノニルフェノールを含む分解生成物は水系中に残りやすい。残ったノニルフェノールが生態系への影響を与えると懸念されている。

図9は、多摩川流域の最下流端である田園調布取水堰における流量の計算結果を示している。各年とも、6月から9月にかけて流量が多く、12月から2月にかけては流量が少ない様子が見られる。

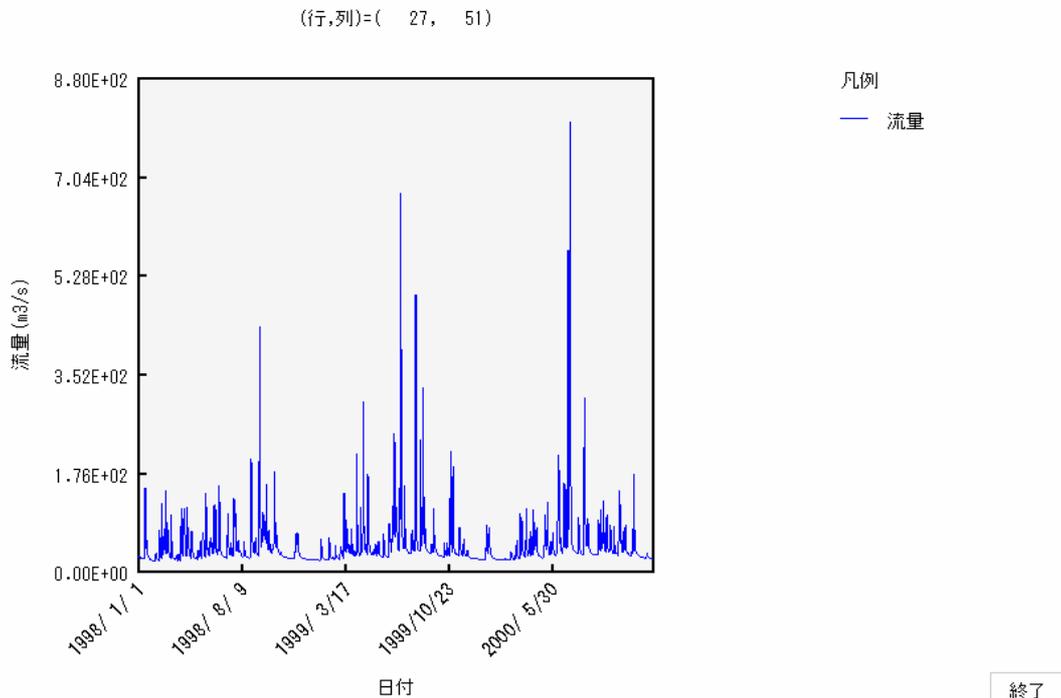


図9 多摩川の田園調布取水堰における1998年から2000年までの流量の時系列変化

図 10 は、多摩川流域における事業所などの排出現場（地先）と下水処理場からのノニルフェノールエトキシレートの排出量を示したものである。下水処理場からの排出量は、業務用洗剤の使用の多い人口密度の多い地域からの排出が多い様子が見られる。

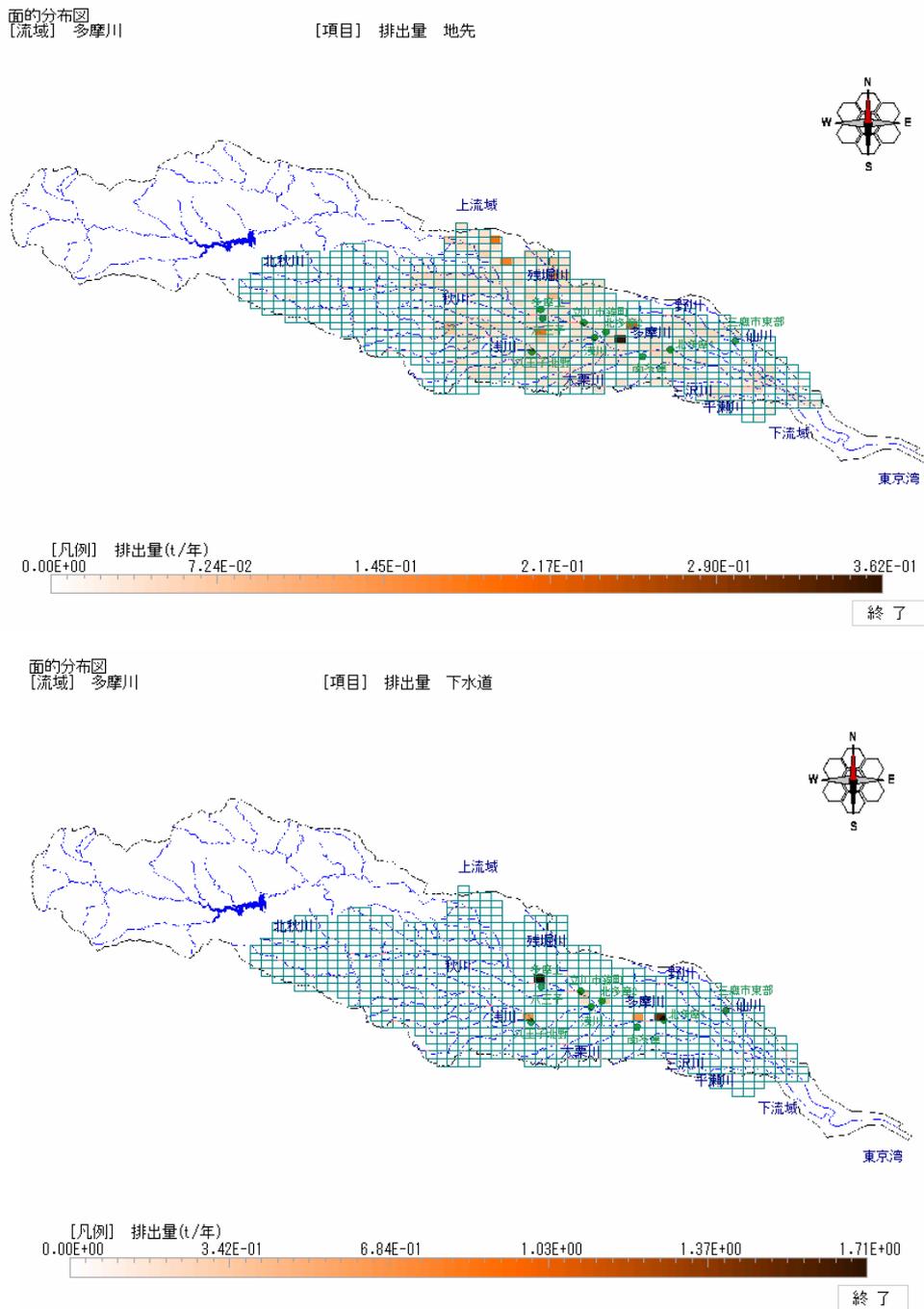


図 10 多摩川流域における NPnEO の排出量  
上段：地先からの排出量、 下段：下水処理場からの排出量

多摩川流域の流量と排出量が推定できたので、次は、暴露濃度の計算である。その結果の1つが図11である。この図は、多摩川流域における平成12年の冬季、夏季のニルフェノールエトキシレートの濃度分布を示している。

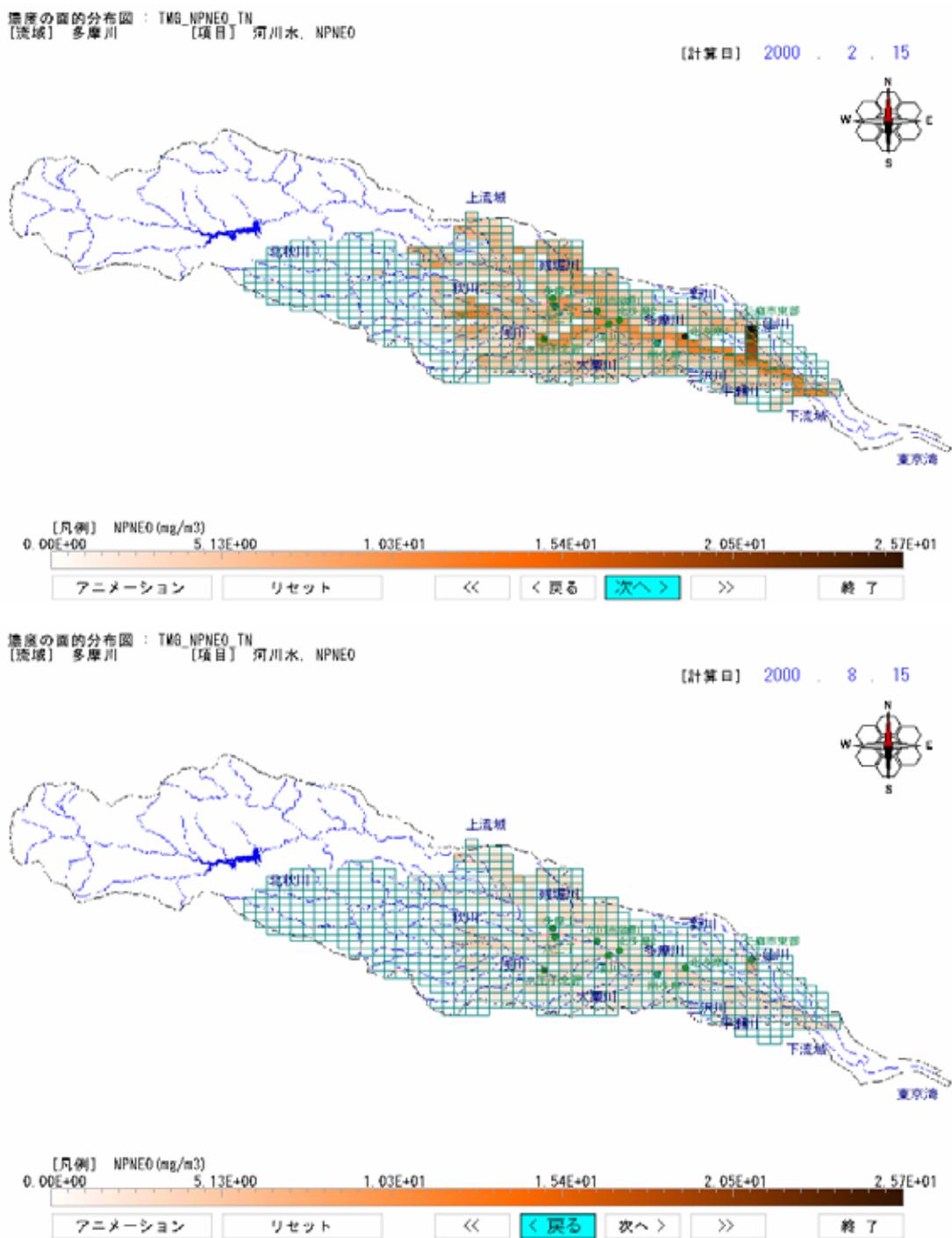


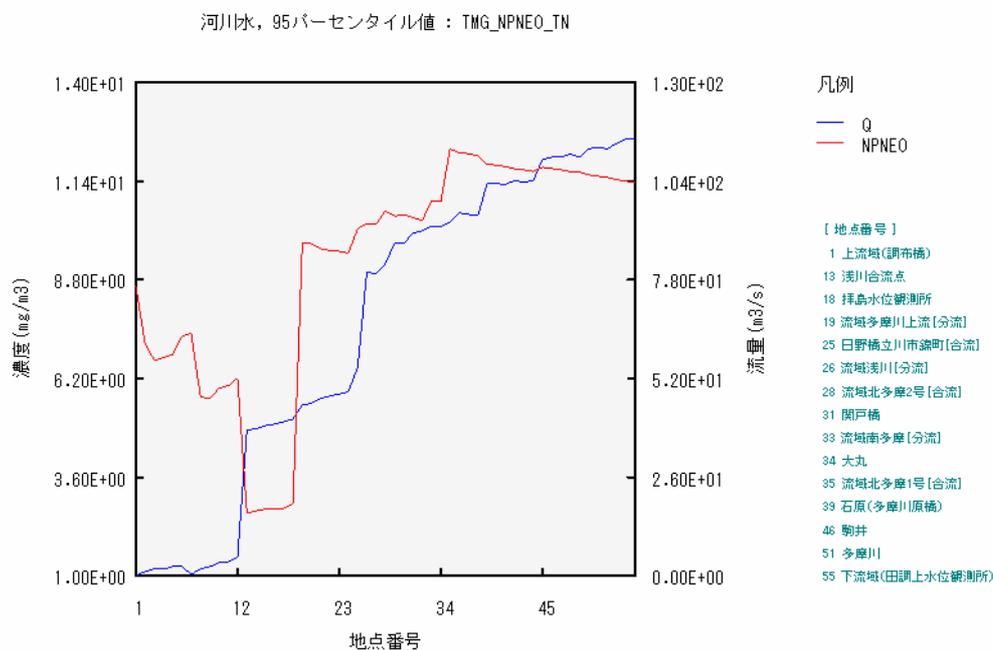
図11 多摩川流域における2000年の冬季と夏季のNPnEOの暴露濃度  
上段:2月15日、下段:8月15日

冬季と夏季の分布図を比べると、冬季の方が比較的濃度が高い様子が見られるであろう。この要因は一体何であろうか？きちんと証明するには、根拠となる事実が必要であるが、例えば、図9を見ると分かるように、冬に降水量が少ない傾向があるので、物質が希釈されずに濃度が高まっていることが考えられる。また、冬は水温が低いために微生物活動が鈍くなり、分解が進まずに濃度が高くなったことも考えられる。

さらに、ノニルフェノールエトキシレートが排出源から徐々に多摩川の下流へと移動している傾向が見られるが、上流の方でも濃度が高くなっているところが見られることから、図10で見たような上流にある排出源の影響があるのではないかということがうかがわれる。

このように、このモデルによる暴露濃度の結果から、排出源を空間的に確認しながら、高濃度が比較的どこに現れやすいかを把握することができる。

図12で、多摩川本川の上流から下流にかけてのNPNEOの暴露濃度を95パーセンタイル値で縦断的に見ると、下水処理場の地点で上昇している様子が見られる。このことから、下水処理場で除去されずに残存した物質が河川へ放流されていることが示唆される。



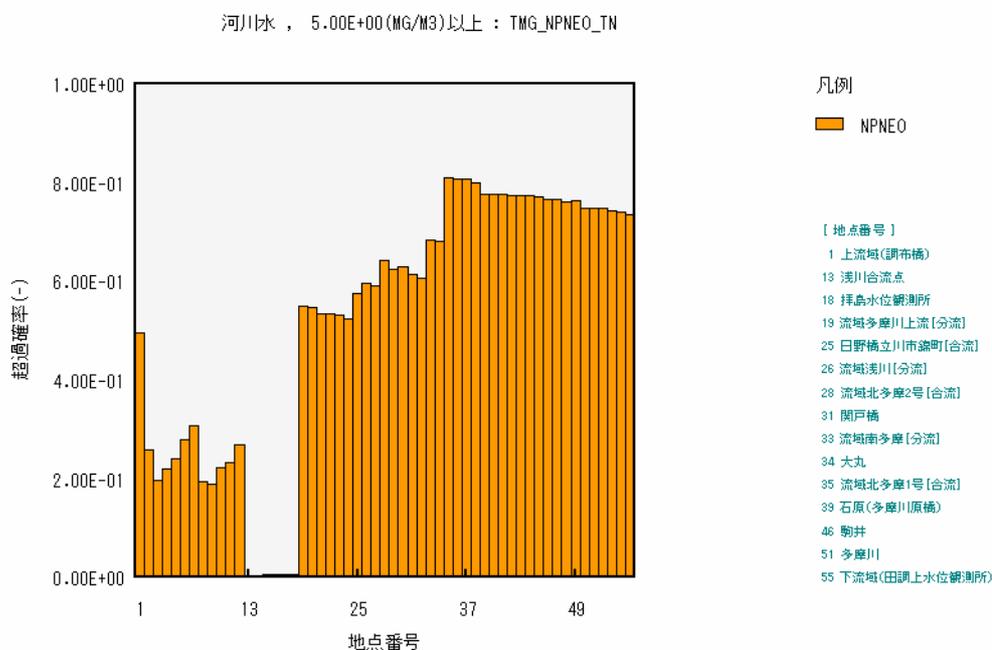
終了

図12 多摩川本川における河川水中NPNEO濃度の95パーセンタイル値の河川縦断図

このようにして得られたノニルフェノール暴露濃度の推定値は、水系における生物に影響があらわれるかどうか、もし影響があらわれる可能性があれば、どの排出源で、どのような対策をとればよいかを考察するために用いることができる。

ここでは、メダカの個体群へのリスクを考え、メダカ個体群が増殖する比率を予測無影響濃度として、その濃度を超過する確率で影響を見る。この確率が高いほど、リスクが高いことになる。例として、多摩川本川におけるノニルフェノールエトキシレートの暴露濃度の計算結果をもとに、多摩川本川におけるメダカ個体群の予測無影響濃度を  $5.0\text{mg}/\text{m}^3$  と仮定して、超過確率を求めた結果を図 13 に示す。多摩川流域の中流から下流にかけて、この超過確率は高くなっており、下水処理場を通過したときには、超過確率がやや低くなる傾向が見られる。

この超過確率を低くするための対策の検討には、どのような排出源対策でどの程度削減できるかを予測する必要がある。このモデルでは、いくつかの対策のケースを想定し、対策効果を定量的に評価することができる。例えば、ある業種の自主管理によって排出量を減らした効果は、PRTR データの該当業種の排出量を変えて、再度計算の実行し、暴露濃度を比較することによって効果を見ることができる。下水処理場における高度化の対策を講じる場合には、下水処理除去率を高くすることで暴露濃度の低下を見ることができる。



終了

図 13 多摩川本川におけるメダカ個体群の予測無影響濃度の超過確率の例

## (2) 暴露濃度の現況再現性

このモデルによる流量の計算結果について観測値に基づいた検証を行う。

図 14 は、多摩川の日野橋地点における日流量の変化を示している。流量の計算値のレベルや変動は観測値と一致しており、SHANEL の流量の推定計算は、十分に再現できているといえる。

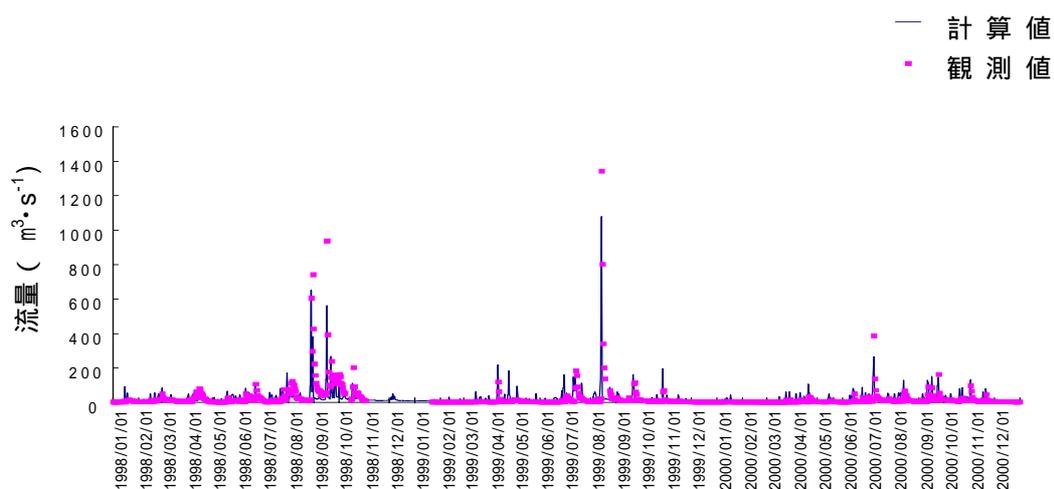


図 14 多摩川の日野橋地点における日流量の変化

図 15 では、多摩川の最下流地点における河川水中暴露濃度の計算値について検証を行った。NpNEO の河川水濃度の計算値は、観測値の範囲と同じ程度のオーダーであり、NP の濃度の計算値は観測値の範囲に収まっている様子が見られた。NpNEO に関しては、SHANEL の計算結果はほぼ検証されたといえる。



図 15 多摩川における NpNEO と NP の河川水濃度の検証結果  
赤色の実線: 計算値、黄色の範囲: 観測値の出現範囲

### (3) その他の解析結果

暴露濃度の推定結果は、その絶対値の大きさと時間的な変化傾向から妥当であるかどうか評価する必要がある。化学物質の暴露濃度の観測は、主に晴天日に行われており、系統的に時間的に連続して行われているものはない。SHANEL では、流出特性として、暴露濃度の推定結果について定性的な検証を行う目的で、時間的に変化する妥当性を流量と流出負荷量とを関連付けた式 (5) に示す  $L-Q$  式の係数  $b$  を用いて評価する。

$$L = aQ^b \quad \dots \text{式 (5)}$$

$L$  : 流出負荷量 (mg/sec)       $Q$  : 流量 (m<sup>3</sup>/sec)  
 $a$  : 濃度のオーダーを示す係数 (-)       $b$  : 負荷流出特性を示す係数 (-)

一般に、水溶性の高い物質では  $b$  が 1 より小さく、懸濁物質への吸着性の高い物質では  $b$  が 1 より大きくなる傾向がみられる。暴露濃度の推定結果から、この傾向が大まかに確認されれば、推定は妥当であると判断する。

$L-Q$  式の係数  $a$ 、 $b$  は回帰分析により決定するが、この回帰式が適切であるかどうかの検定は  $t$  値により判断する。指定した有意水準 に応じた  $t$  を  $t$  値が上回れば回帰式は有意である。

例として、多摩川の最下流地点における  $L-Q$  式の結果を図 16 に示す。

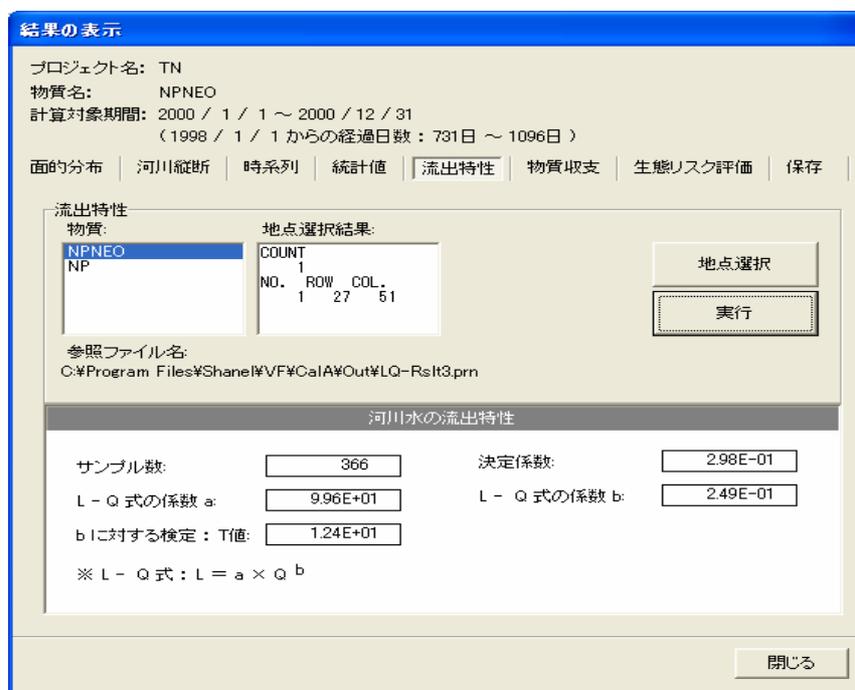


図 16 多摩川の最下流地点における流出特性の結果

また、流域内に流入した化学物質の量に対する流域外へ流出した量の割合を求め、物質収支として評価を行うことができる。図 17 は、2000 年に多摩川流域に流入した地先および下水処理場からの NPnEO の排出量、および河川水、地下水層、取水によって流域外へ流出した NPnEO の流下負荷量と、その割合を流出率で示したものである。この結果から、多摩川流域に流入した NPnEO は 18,300kg、流域外に流出した NPnEO は 8,610kg となり、流出率が 47%であったことがわかる。したがって、NPnEO の残りの 53%は、流域内で分解されたか、河川底泥や土壌などに吸着して残存したことが示唆される。



図 17 多摩川流域における 2000 年の NPnEO の物質収支

### 3.3.4 Turbo-SHANEL の計算結果

SHANEL が時空間的に詳細な計算を行うために計算時間を要するのに対して、Turbo-SHANEL は、任意の流域における晴天時の河川水中濃度を即時に大まかに計算できるモデルである。Turbo-SHANEL では、河川水の高濃度のレベルを推定することを目的としているため、晴天時における河川水中濃度、すなわち濁水流量（年間の流量日系列に対して降順 355 日目）から低水流量（年間の流量日系列に対して降順 275 日）に相当する濃度を求めることになる。この河川水中濃度は、年間の 95 パーセンタイル値と 75 パーセンタイル値に相当する。なお、分解代謝物は対象としていない。

Turbo-SHANEL における化学物質の河川水中濃度は、式(6)で示すように、流域全体の排出量と流量、さらに、河川水中における溶存態の比率、および溶存態における生分解により定義される浄化残率で決まるものとする。

$$C = \frac{I \cdot f_w \cdot k_w}{Q} \quad \dots \text{式(6)}$$

$C$  : 河川水中濃度の確率分布 ( $\mu\text{g}/\lambda$ )       $I$  : 排出量 (mg/sec)

$f_w$  : 溶存態比率 (-)       $k_w$  : 溶存態における生分解により定義される浄化残率 (-)

$Q$  : 流量の確率分布 ( $\text{m}^3/\text{sec}$ )

溶存態比率は、河川水中における溶存態と懸濁態との分配平衡を仮定する。溶存態における生分解により定義される浄化残率は、物質の生分解の速度に基づくものとする。なお、下水処理の除去率は、物質の生分解速度と相関関係があると考えられることから、物質の半減期の範囲に応じた下水処理除去率を設定している。排出量については、PRTR データによる全国の水域への排出量や下水道への移動量が、流域の都市的な面積に比例配分されるものとして、都市化度（操作マニュアル p.112 参照）によって重み付けして流域に割り振る。

流量の確率分布は、対数正規分布を仮定し、その母数は流域面積から決定する。流量年表の観測値に基づいて、流量の平均値はそのまま適用し、標準偏差は、豊水、平水、低水、濁水流量と平均流量から最尤法によって求める。これらの流量の確率分布と化学物質の溶存態比率、溶存態における生分解により定義される浄化残率のパラメータから、モンテカルロシミュレーションを適用し、河川水中濃度を確率分布として求める。

Turbo-SHANEL の計算結果は、SHANEL で推定した 4 つの流域における NPnEO と AE の計算結果と濃度のオーダーのレベルで一致していることが確かめられている。

## 4. AIST SHANEL の特徴

### 4.1 SHANEL の特徴

SHANEL には、次のような特徴がある。

- (1) 今回の Ver.0.8 では、多摩川（東京都、神奈川県）、日光川（愛知県）、大聖寺川（石川県）、石津川（大阪府）の4つの流域を対象として、1998年から2000年までの任意の期間において、1×1kmメッシュの空間分解能および日単位での河川水、河川底泥の暴露濃度を計算する水-固相系のマルチメディアモデルである。
- (2) PRTR データによる排出量を利用した計算が可能である。
- (3) 物質の流出特性や物質収支、生態リスク評価に関する機能を備えている。
- (4) 排出量の削減や下水処理の高度化などのリスク削減対策の効果を評価することができる。

### 4.2 Turbo-SHANEL の特徴

Turbo-SHANEL は、任意の流域全体における大まかな暴露濃度を短時間で計算したいときの簡易解析モデルである。ユーザーは、対象とする化学物質の PRTR データに基づいた全国の水域への排出量、有機炭素水分配係数、河川水における半減期、および対象流域の流域面積と都市化度を入力するだけで、対象流域の晴天時における暴露濃度のレベルを知ることができる。計算に必要なデータやパラメータは少なく、かつ入手しやすいため、ユーザーフレンドリーな解析ツールとなっている。

### 4.3 AIST-SHANEL の支援内容

このような特徴を持つ AIST - SHANEL は、日本における水系の化学物質リスク評価ツールや教育用ソフトとして、次のようなことに役立つと考えられる。

- ・ ある業種の生産企業、加工企業、ユーザー企業が自社製品の自主管理をする場合、排出量を削減した場合の効果について知りたいときに、SHANEL で排出量を削減した前後の濃度を比較して対策効果を見ることができる。
- ・ 地方自治体などで化学物質の管理を行う部局が、地域のリスクを推定するため、観測値を収集し、データをときに、SHANEL を利用することができる。
- ・ 教育機関が、水系における化学物質のリスク評価とは何かを学習させる。
- ・ NPO が、地域の水系のリスクを推定する。

## 5. 実習メニュー

関東地方の都市河川として代表的な多摩川流域を対象に、さまざまな産業で使用されているノニルフェノールエトキシレート (NPnEO) について、2000年9月の暴露濃度を推定し、基本的な AIST-SHANEL の操作を試してみる。

## 参考文献

- Mackay,D.(2001) : Multimedia Environmental Models. The Fugacity Approach, Lewis publishers, p.261.
- Schwarzenbach,R.P., Gschwend,P.M. and Imboden,D.M. (1993) : Environmental Organic Chemistry, John Wiley & Sons,Inc., p.681.
- Thomann,R.V. and Mueller,J.A.(1987) : Principles of Surface Water Quality Modeling and Control, Harper Collins Publishers, p.644.
- 合田健 編 (1979) : 水環境指標、思考社、p.392.
- 國松孝男、村岡浩爾 (1989) : 河川汚濁のモデル解析、技報堂出版、p.266.
- 経済産業省経済産業政策局調査統計部 (旧・通商産業省調査統計部)(1954 - 2003) : 工業統計表 昭和 26 年 - 平成 13 年
- 土木学会 (1999) : 水理公式集 平成 11 年度版、丸善、p.713.

## 用語の説明

**閾値濃度**：用量反応関係が濃度の変化に対して、反応あり・なしで定義されるときの、反応率 1 をもたらず濃度。

**L-Q 式**：負荷量 ( $L$ ) の流出特性を流量 ( $Q$ ) によって回帰させた関係を示す式。  
次のような式が用いられる。 $L = \alpha Q^\beta$  ;  $\alpha$ 、 $\beta$  は未知パラメータ。

**下水処理除去率**： $\frac{C_{in} - C_{out}}{C_{in}}$  で定義される指標。 $C_{in}$  ; 処理場への流入濃度、  
 $C_{out}$  ; 処理場からの流出濃度。活性汚泥による吸着と分解等を含む。

**懸濁物質**：浮遊物質ともよばれ、水の濁りの原因となる物質。口径  $1\mu\text{m}$  のフィルターを通過しない物質。

**蒸気圧**：一定の温度において液相または固相と平衡にある蒸気相の圧力。化学物質の液相・固相から気相への分配の程度を示す物性値であり、温度に依存する。

**生態リスク**：生態系への悪影響の発生しうる程度を示す指標。

**超過確率**：あらかじめ決められた、ある値を上回る確率。

**パーセンタイル (値)**：分位点。測定値を大きさの順にならべて、定義される値。任意の定数 ( $0 < p < 1$ ) に対し、 $100p\%$  分位点が定義される。75 パーセンタイル値とは、小さい方から並べた値は全体の 75% に相当する値である。

**暴露解析**：人や生態系に化学物質がどんな経路でどのくらい到達するかを明らかにすること。

**暴露濃度**：人が摂取する断面での環境媒体中化学物質濃度。大気中濃度、室内空気中濃度、食品中濃度等。

**半減期**：物質の量が初期存在に対して  $1/2$  になるまでに要する時間。

**反応分率**：化学反応  $A \rightarrow B_i$  ( $i=1, 2, \dots$ ) において、特定の反応経路  $i$  が全体に占める割合。

**P R T R** : P R T R制度 (Pollutant Release and Transfer Register) とは、人の健康や生態系に有害なおそれのある化学物質について、事業所からの環境 (大気、水、土壌) への排出量及び廃棄物に含まれての事業所外への移動量を、事業者が自ら把握し国に対して届け出るとともに、国は届出データや推計に基づき、排出量・移動量を推計して公表する制度。P R T R制度は、平成 13 年 4 月から実施されている。

**微生物分解** : 微生物による化学物質の分解作用。

**分子量** : 分子 1 モルの質量をグラム単位で示した数値。

**水溶解度** : 1 の水に溶け込める物質のグラム数。

**メッシュ** : 格子。グリッドとも呼ばれる。濃度分布などを離散的に計算する場合の最小単位。AIST - SHANEL では、1×1km であり、この空間的解像度で分布が得られる。

**有機性炭素含有率** : 懸濁物質や底泥に含まれる有機性炭素の含有率。

**有機性炭素分配係数** : 化学物質の水 - 有機性炭素系における分配係数。懸濁物質、底泥に含まれる有機性炭素への蓄積の傾向の強さを示す。

**落水線** : 降水が河川に流入する経路。

**リスク評価** : 原因物質の有害性の内容と用量反応関係を決定するとともに暴露濃度に応じた当該有害性の反応率を求めること。

**流域** : 分水嶺で区切られた地域。

**流量** : 単位時間、単位断面積を通過する量。河川流量であれば、単位時間流水断面積を通過する水の量を意味する。