

化審法における優先評価化学物質に関する
リスク評価の技術ガイダンス

VII. 暴露評価

～様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ
及び残留性の評価～

Ver.1.0

平成 26 年 6 月

厚生労働省・経済産業省・環境省

改訂履歴

Version	日付	改訂内容
Ver .1.0	平成 26 年 6 月	初版

目次

VII. 暴露評価 ～様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ及び残留性の評価～	1
VII.1 はじめに.....	1
VII.1.1 本章の位置づけ	1
VII.1.2 他の章との関係	3
VII.2 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計.....	3
VII.2.1 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計の位置づけ.....	3
VII.2.2 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計に用いる数理モデルの概念	6
VII.3 環境中濃度等の空間的分布の推計	12
VII.3.1 環境多媒体モデル G-CIEMS.....	12
VII.3.2 モデルの特徴.....	16
VII.4 残留性の評価.....	22
VII.4.1 目的等.....	22
VII.4.2 多媒体モデルの利用	22
VII.5 付属資料.....	25
VII.5.1 はじめに	25
VII.5.2 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計と残留性の推計に用いる数 理モデル	25
VII.5.3 G-CIEMS モデルの解説.....	39
VII.5.4 環境中濃度等の空間的分布の推計における人の摂取量.....	48

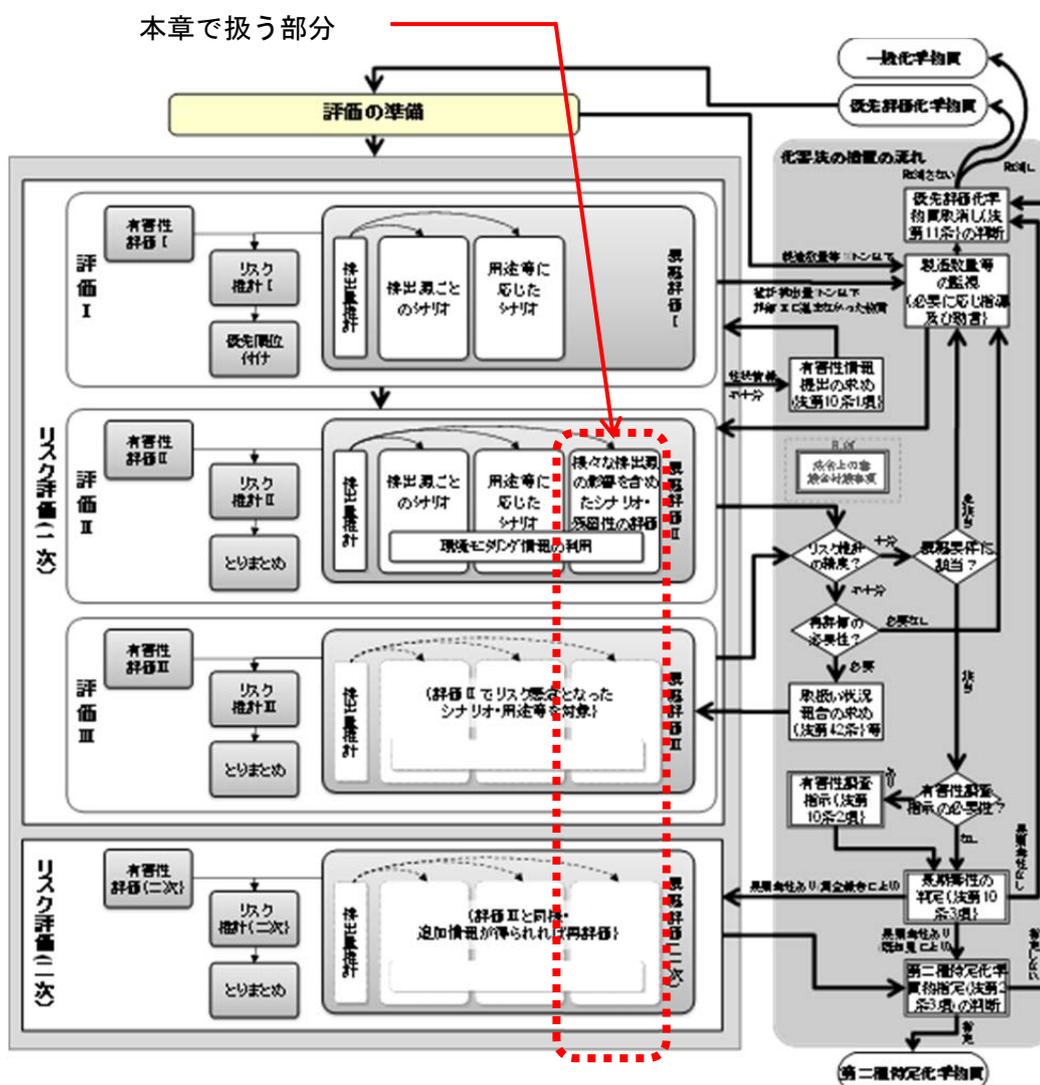
VII. 暴露評価

～様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ及び残留性の評価～

VII.1 はじめに

VII.1.1 本章の位置づけ

本章では、優先評価化学物質のリスク評価における暴露評価のうち、様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ及び残留性の評価について解説する。リスク評価の手順フロー全体における本章で扱う部分を図表 VII.1 に示す。



図表 VII.1 リスク評価の手順フローにおける本章で扱う部分

暴露評価Ⅱでは、「様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ」に基づく評価を実施する。

1 このシナリオでは用いる情報によって実施する内容が異なり、概要は以下のとおりである。

2
3 (ア) 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計

4 (用いる情報：製造数量等の届出情報、PRTR 情報)

5 本シナリオでは、多媒体モデル¹を用いて、広域的（日本全域を想定）・長期的²（定
6 常状態を想定）な暴露状況の推計を行う。製造数量等の届出情報を用いて推計する場
7 合は、製造段階、調合段階、工業的使用段階、家庭用・業務用での使用段階、長期使
8 用製品の使用段階、全てのライフサイクルステージでの推計排出量を合計して用いる。
9 PRTR 情報が利用できる場合は、別途、届出排出量と届出外排出量を合計して用いる。

10
11 (イ) 環境中濃度等の空間的分布の推計

12 (用いる情報：PRTR 情報等)

13 PRTR 情報等の地理的な情報を含む排出量情報が得られる場合には、面的な排出源（家
14 庭、移動体等）を含めた全国の排出源からの排出量を基に、地図上の区画（メッシュや小
15 流域等）ごとに環境中濃度を推計するモデルを用いて、環境中濃度の空間的分布を全国レ
16 ベルで推計した上で、暴露量（又は暴露濃度）（人健康の場合は摂取量、生態の場合は環境
17 中濃度）を推計する。この際、化審法の規制対象の範囲外の排出量の影響について可能な
18 限り解析するため、例えば、明らかに化審法の規制対象の範囲外となる PRTR 情報につい
19 ては除外したケースについても推計を行う。

20 暴露評価Ⅱでは、「残留性の評価」も行う。その概要は以下のとおりである。

21
22 (ウ) 優先評価化学物質の環境中での残留性の指標として、多媒体モデルを用い、環境中
23 の総括残留性（Pov）等を推計する。

24
25 (エ) 複数年の環境モニタリング情報が得られる場合には、環境媒体ごとの経年的な検出
26 状況について整理する。

27
28 本章では残留性の評価のうち、多媒体モデルを用いる(ウ)についても記述する。本章にこ
29 れを含める理由は、様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオの前述の「(ア)広域的・長期
30 的スケールの暴露状況の推計」と同じモデルを用いるためである。環境モニタリング情報
31 を用いる(エ)は「第八章 環境モニタリング情報を用いた暴露評価」に記述する³。

1 多媒体モデル：環境中に排出された化学物質が、大気、水、土壌、底質などの環境媒体間において、輸送・移動、分配され、また化学的または生物学的に分解される等の環境中の化学物質の動態を同時に評価するための数理モデル。

2 この「長期的」という言葉は、長期暴露や長期使用製品の使用段階の「長期」とは意味が異なる。環境中濃度が定常状態に到達するまで排出開始から長い年月がかかる化学物質もあるため「長期的」という表現を用いている。

3 環境モニタリング情報を用いるのは残留性の評価だけではない。各暴露シナリオに対応するとみなせる環境モニタリング情報があれば、当該暴露シナリオに対応する環境中濃

1

2 VII.1.2 他の章との関係

3 前項のとおり、製造数量等の届出情報や PRTR 情報を数理モデルに用いる部分は本章に
4 記述し、環境モニタリング情報を用いる部分はVIII章に記述している。

5 人の摂取量の推計に用いる計算式は「V章 排出源ごとの暴露シナリオ」と基本的には
6 同じである。ただし、「様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ」の数理モデルを用いる
7 部分で想定している環境スケールが「排出源ごとの暴露シナリオ」とは違うため、暴露係
8 数（食品摂取量等）が一部異なる。適宜、V章を引用するので詳細はそちらを参照された
9 い。

10

11 VII.2 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計

12 ここでは「様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオ」のうち、広域的・長期的スケー
13 ルの暴露状況の推計について説明する。製造数量等の届出情報や PRTR 情報（得られる場
14 合）を多媒体モデルに入力して推計を行う。

15 本節では、位置づけを VII.2.1 で述べ、評価に使用する数理モデルの特徴、概念と適用方
16 法を VII.2.2 で説明する。

17

18 VII.2.1 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計の位置づけ

19 本節では、広域的・長期的スケールの暴露状況の推計の位置づけとして、役割及び推計
20 項目について解説する。

21

22 VII.2.1.1 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計の役割

23 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計を行う目的は、評価 I で実施した「排出源ご
24 との暴露シナリオ」や「用途等に応じた暴露シナリオ」とは異なる空間と時間のスケール
25 で、対象物質の環境中の分配状況等を概観し、暴露状況の解釈に利用することである。

26

27 評価 II において、「排出源ごとの暴露シナリオ」で PRTR 情報を用いる場合は 24 の届出
28 対象業種からの届出排出量が用いられる。一方で、移動体の排ガス、家庭、非対象業種等
29 の届出外排出量等は評価には含まれない。「用途等に応じたシナリオ」では、化審法の製造
30 数量等の届出情報で得られる詳細用途分類に係る推計が PRTR 情報に含まれていれば評価
31 に用いる場合があるが、すべての届出外排出量を用いるわけではない。すなわち、「排出源
32 ごとの暴露シナリオ」や「用途等に応じたシナリオ」で対象としていない排出源からの排
33 出量が総排出量の多くを占めるような優先評価化学物質の場合は、排出源ごとの暴露シナ

度等として利用する。第VIII章を参照のこと。

1 リオ等では化学物質の暴露状況の全ては捉えていないということになる。このため、広域
2 的・長期的スケールの暴露状況の推計においては、非点源（線源・面源と言われることも
3 ある）に分類される排出源からの排出も考慮した暴露状況を推計し、他の暴露シナリオを
4 補足する必要がある。

5
6 具体的には、例えば「排出源ごとの暴露シナリオ」であれば特定の排出源の影響を受け
7 る範囲（大気への排出の場合では排出源から半径 1km～10km までの評価エリア）を対象
8 としていたが、ここでは特定の排出源の影響下ではない日本全域の一般環境を対象とする。
9 また、製造数量等の届出情報を用いて推計では、製造段階、調合段階、工業的使用段階、
10 家庭用・業務用での使用段階、長期使用製品の使用段階、全てのライフサイクルステー
11 ジでの推計排出量を合計して用い、PRTR 情報が利用できる場合は、別途、届出排出量と届
12 出外排出量を合計して用いる¹。利用する排出量の詳細は、IV章の様々な排出源の影響を含
13 めた暴露シナリオにおける排出量推計に関する記載を参照されたい。

14 また、排出源ごとの暴露シナリオでは、必ずしも環境中濃度等が一定となる定常状態を
15 仮定していないが、ここでは十分に長い時間が経って定常状態に到達した時の状況を対象
16 とする。このように地理的に広大で時間的に長期的なスケールにおける化学物質の環境中
17 の動態を推計する。

18 以上の役割のため、本スキームでは多媒体モデルを用いて、以下の推計を行う。各項目
19 の具体的な内容は本節の VII.2.1.2 で後述し、モデルについては次節 VII.2.2 と付属資料で
20 説明する。

- 21
- 22 ・ 環境媒体間の分配比率（広域・定常状態における）
- 23 ・ 人の摂取量の摂取媒体別比率（広域・定常状態における）
- 24

25 VII.2.1.2 推計項目

26 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計では、日本全体という広大な環境をいくつか
27 の環境媒体から成る箱（コンパートメント）と捉え、これに対象物質の日本国内の総排出
28 量を入力し、その排出量が継続するものと仮定した場合に長期的に到達する定常状態にお
29 ける環境媒体間の分配比率等を推計する。このような推計モデルは多媒体モデル（マルチ
30 メディアモデルともいう）といい、このタイプの数理モデルによる環境媒体間の分配比率
31 は OECD の SIDS 項目の 1 つでもあり²、環境動態を考察するうえで国際的に重要な情報の

¹ 後述するように、非点源等の影響を考察するため「排出源ごとの暴露シナリオ」で用いて
いる排出量の総量（製造数量の届出情報の場合は製造段階、調合段階、工業的使用段階の
排出量の全国合計値。PRTR 情報の場合は届出排出量の全国合計値。）を使って計算した
結果と比較する。

² SIDS 項目である Transport and Distribution の Transport and Distribution between
Environmental Compartments に該当する。
OECD (last update 2012) Manual for assessment of chemicals. Chapter 2. Data

- 1 1つとみられている（モデルについては次節 VII.2.2 と付属書で説明）。
- 2 多媒体モデルを用いて VII.2.1.1 で記したように以下の項目を推計する。
- 3
- 4 ・ 環境媒体間の分配比率（広域・定常状態における）
- 5 ・ 人の摂取量の摂取媒体別比率（広域・定常状態における）
- 6
- 7 以下、順に説明する。
- 8

9 (1) 環境媒体間の分配比率

10 化学物質が長期的には環境媒体のいずれに分配される傾向があるかを予測するものであ
11 る。この結果は、環境モニタリング調査を行う場合に着目すべき媒体の見当をつけること
12 等にも役立つ。

13

14 (2) 人の摂取量の摂取媒体別比率

15 本項目は(1)の延長線上で、化学物質の環境媒体別の存在量を人の摂取量の摂取媒体別比
16 率に外挿したものである。モデルにより予測した環境媒体別の存在量から環境媒体別濃度
17 を推計し、そこから食物（魚介類、農作物、畜産物）中の濃度を推計する（環境中濃度か
18 ら食物中濃度を推計する数式は「排出源ごとの暴露シナリオ」で用いているものと同様）。
19 それらの一定量を摂取すると仮定し、全経路からの摂取量（大気吸入、飲料水摂取、魚介
20 類摂取、地上部農作物摂取、地下部農作物摂取、牛肉摂取、乳製品摂取の 7 経路）を摂取
21 媒体別比率にしたものである。これは特定の排出源の影響下ではない広域的・長期的な人
22 の暴露状況を表しているといえる。

23 この結果は、例えば以下のように解釈に用いる。

24 ある化学物質は、排出源ごとの暴露シナリオの評価ではほとんどが大気に排出され、人
25 の暴露経路も大気吸入が主体であったとする。一方、物質の特性としては大気から水域へ
26 の沈着や土壌から水域への移行も起こり、長期的には水域に溜まり広域的・長期的スケ
27 ルの暴露状況の推計では魚介類摂取の経路の寄与が大きいことが計算されたとする¹。この
28 ような場合は、人の健康へのリスクの懸念については「排出源ごとの暴露シナリオ」の結
29 果のみで判断せず、一般環境（特定の排出源の影響を受けていない地域）の魚介類の濃度
30 レベルも確認した上で判断すべき、といった解釈につながる。逆に、広域的・長期的スケ
31 ルの暴露状況の推計でも、「排出源ごとの暴露シナリオ」の評価と同じ媒体からの摂取経
32 路が主体であれば、排出源周辺の濃度は必ず一般環境中濃度よりも高いため、排出源ごと
33 の暴露シナリオの評価結果をもってリスクが懸念されるか否かの判断を支持すると考えら

gathering and testing.

(<http://www.oecd.org/env/ehs/testing/49944183.pdf>)

¹ 排出源ごとの暴露シナリオで用いている推計モデルでは大気と水域間の環境中の分配・移行を考慮していないため、このような評価はできない（図表 VII.3 参照）。

1 れる。

2
3 (1)の「環境媒体間の分配比率」と(2)の「人の摂取量の摂取媒体別比率」については、「排
4 出源ごとの暴露シナリオ」で用いている排出量の総量（すなわち点源の総量）で推計した
5 場合と、それに加えて、製造数量等の届出情報を用いる場合であれば家庭用・業務用での
6 使用段階や長期使用製品の使用段階からの排出も加味した排出量の総量で推計した場合の
7 比較を行い、後者の非点源からの寄与の影響度についても考察する。同様に PRTR 排出量
8 を用いる場合は、届出排出量に届出外排出量を加味した場合とそうでない場合を比較し考
9 察する。

10
11 以上のように、広域的・長期的スケールの暴露状況の推計を加えることによって、化学
12 物質の暴露状況を様々な視点から眺め、「暴露要件」への該当性を多面的に判断できるよう
13 にすることを意図している。これらは環境中での動態の概略把握、化学物質の暴露状況を
14 重層的に理解するために重要である。

15 ただし、このような評価を行うのは本来、入力する物理化学的性状等のデータが適切で
16 あるのが前提であるため、推計結果の利用・解釈には入力データの信頼性の評価も併せ行
17 うことが重要となる^{1,2}。このことについてはIX章で説明する。また、たとえ適切な物理化
18 学的性状等のデータを用いても排出量の媒体間分配やモデル自体の不確実性等の様々な要
19 因が推計結果に影響を及ぼしていることに留意が必要である。

21 VII.2.2 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計に用いる数理モデルの概念

22 本節では、広域的・長期的スケールの暴露状況に用いる数理モデル（多媒体モデル）に
23 ついて、(VII.2.2.1) 多媒体モデルの種類等、(VII.2.2.2) 排出源ごとの暴露シナリオと

¹ 広域的・長期的スケールの暴露状況に限らず、数理モデルを用いた暴露評価であればど
れも同じである。EU-TGD に基づく推計モデルの説明書でも以下のように述べられてい
る。

「たとえ完璧なモデルであっても、入力データの品質管理を無視したりおざなりにすれ
ば、信頼できない結果しか得られない」

Lijzen, J.P.A and Rikken, M.G.J. eds. (2004) European Union System for the
Evaluation of Substances. EUSES 2.0 Background Report. 1.8 System Limitations.

² U.S. EPA は、高生産量（HPV）化学物質を含む既存化学物質の環境媒体間の分配を評価
するため、レベルⅢタイプの多媒体モデル（本スキームの推計で使用しているものと同
等の適用を強く推奨している。ただし、それは HPV 物質のようにモデルに入力する物理
化学的性状や環境中半減期の大部分の実測データが得られる場合に使用するのが適切
であるとしている。また、U.S. EPA は「このタイプのモデルは PBT 物質の環境残留性
や長距離移動性の評価に有用であり、推定環境中濃度を定量的な暴露評価に使うに
は適さない」という見解を示している。

U.S. EPA, OPPT (2006) Recommendations for Estimating Transport Between
Environmental Compartment (Fugacity) for Existing chemicals, including HPV
chemicals.

(<http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/eqchpv.htm>)

1 の比較、(VII.2.2.3) 本スキームで用いる数理モデル、(VII.2.2.4) 数理モデルの概念及
2 び (VII.2.2.5) 数理モデルの適用について解説する。本節に係る詳細は付属資料 VII.5.2
3 に記載している。

4

5 VII.2.2.1 多媒体モデルの種類等

6 化学物質の長期間にわたる環境中での動態を評価するには、コンパートメントモデルが
7 適している。コンパートメントモデルの 1 つである多媒体モデルは、化学物質の環境中
8 の移流、拡散、分解、他の環境媒体への移行といった様々なメカニズムを考慮し、環境媒
9 体（大気、水域、土壌、底質等）間の分配や残留量を算定する。多媒体モデルの多くはこ
10 のような 4 つの環境媒体（大気、水域、土壌、底質）で構成され、環境に排出された後の
11 化学物質の長期的、広大な空間での環境媒体間の分配や残留程度を評価するのに適してお
12 り、広域的・長期的スケールの暴露状況の推計でも適用することとした。

13 多媒体モデルは、前提としている条件・複雑さから下表のようにレベル I～IV の 4 段階
14 に分類されている¹。平衡／非平衡（環境媒体間で平衡状態を仮定する／仮定しない）、定常
15 ／非定常（無限時間後に到達する状態を仮定する／仮定しない）、反応・消失過程（分解等
16 の化学的、生物学的な化学物質の変化・消失の有無）、閉鎖系／開放系（化学物質の連続的
17 な系外からの流入・系外への流出を考慮しない／考慮する）の条件の違いで特徴づけられ
18 ている。

19

20 図表 VII.2 多媒体モデルのレベルと前提条件の対応

レベル	主な前提条件			
	平衡／非平衡	定常／非定常	反応・消失過程	閉鎖系／開放系
I	平衡	(定常)	なし	閉鎖系
II	平衡	定常	あり	開放系
III	非平衡	定常	あり	開放系
IV	非平衡	非定常	あり	開放系

21

22 当時の OECD の HPV プログラムの文書²では、ポスト SIDS のステージ³において、各国
23 が初期レベルの環境経由暴露を評価するのに適用できるモデルとして推奨されているモデ
24 ル群（CHEMCAN、CHEMFRAN、MNSEM 等。MNSEM は VII.2.2.3 で後述するよう

¹ Mackay, D. (1972) Finding Fugacity Feasible. Environ. Sci. & Technol., 13(10), 1218-1223.

² OECD (1994) Provisional Guidance for the Initial Assessment of Environmental Exposure. (<http://www.oecd.org/env/ehs/risk-assessment/1947565.pdf>)

ただし、この文書は当時の HPV プログラムのものであり、後継の CoCAM (Cooperative Chemicals Assessment Programme) で使用されておらず参考としての扱いである。

³ SIAM の結果、追加作業の候補として特定された場合、SIDS 提出後の (post-SIDS) 作業に詳細な暴露情報の収集と評価およびリスク評価が含まれている。大半のケースでは、暴露評価は各国内（または地域内）で実施される。

1 に本スキームで用いる MNSEM3β NITE 版の元である)はいずれも図表 VII.2 のレベルⅢ
 2 に相当し、EU のリスク評価で使用されているリスク評価システム EUSES に含まれる多媒
 3 体モデル Simple Box もレベルⅢである。

4

5 VII.2.2.2 排出源ごとの暴露シナリオとの比較

6 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計では、広域環境を 4 つの媒体（大気・水域・
 7 土壌・底質）から成る 4 つの箱（コンパートメント）と捉え、媒体内は均一濃度と仮定し
 8 た多媒体モデルを用いる¹。排出源ごとの暴露シナリオと広域的・長期的スケールの暴露状
 9 況の推計とで空間スケールや推計内容等を対比したものを図表 VII.3 に示す。

10 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計では、日本全域という広域・巨大な媒体内を
 11 均一・完全混合という簡略化をして推計を行っている点に留意が必要である²。

12

13

14 図表 VII.3 排出源ごとの暴露シナリオと広域的・長期的スケールの暴露状況の推計に
 15 おける評価スケールや推計内容等の比較

	排出源ごとの暴露シナリオ	広域的・長期的スケールの暴露状況の推計
評価空間スケール	排出源の周辺半径 1～10km のエリア	日本全域
推計に必要な化学物質の情報	<ul style="list-style-type: none"> 物理化学的性状一式 排出源ごとの排出量（大気、水域の媒体別） 土壌中の分解速度（又は半減期） 	<ul style="list-style-type: none"> 物理化学的性状一式 日本国内の総排出量（大気、水域、土壌の媒体別） 媒体ごと（大気、水域、土壌、底質）の分解速度（又は半減期）
推計する内容	以下の項目について排出源周辺のエリア内平均値を推計 <ul style="list-style-type: none"> 媒体別の環境中濃度 人の摂取量 	広域環境を 4 つの媒体から成る箱（コンパートメント）と捉えた時の以下を推計 <ul style="list-style-type: none"> 媒体間の分配比率 人の摂取量の摂取媒体別比率
長所	<ul style="list-style-type: none"> 推計濃度は暴露シナリオの設定次第で排出源近傍の高濃度や高暴露集団の把握に適する 	<ul style="list-style-type: none"> 化学物質のトータルの物性からの環境中における分配・動態の概略把握に適する 4 つの媒体すべての半減期を考慮 4 つの媒体間の分配・移動を考慮

¹ 1 媒体を 1 つの箱（コンパートメント）と仮定するのではなく、より詳細な空間に分解して濃度の地理的な分布を推計する多媒体モデルも存在する（「VII.3 環境中濃度等の空間的分布の推計」を参照）。

² 海外の多媒体モデル（Simple Box、ChemCAN）を扱った文献には以下のものがある。本スキームで用いるモデル MNSEM については、この後の VII.2.2.3 の脚注を参照。

- Kawamoto, K., Macleod, M. and Mackay, D. (2001) Evaluation and comparison of multimedia mass balance models of chemical fate: application of EUSES and ChemCAN to 68 chemicals in Japan. Chemosphere Vol. 44. 599-612.
- Jager, T. ed. (1998) Evaluation of EUSES: inventory of experiences and validation activities. RIVM report 679102 048.

	排出源ごとの暴露シナリオ	広域的・長期的スケールの暴露状況の推計
短所又は留意点	<ul style="list-style-type: none"> ・ 大気への排出と水域への排出でシナリオが分かれ、媒体間移動の考慮は限定的 ・ 環境中での分解の半減期の考慮は土壌のみ 	<ul style="list-style-type: none"> ・ 広域・巨大な媒体内は均一・完全混合という単純化 ・ 媒体別の物質量を媒体の体積で除した推計濃度は、排出源近傍の高濃度や高暴露集団を把握するには適さない

1

2 VII.2.2.3 本スキームで用いる数理モデル

3 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計において、本スキームでは MNSEM¹ という日
4 本版の多媒体モデルをベースにし、一部改良を加えたものを MNSEM3 β NITE 版として使
5 用する。前述したように MNSEM は OECD の HPV プログラムの文書において、ポスト
6 SIDS のステージにおいて各国が初期レベルの環境経由暴露を評価するのに適用できるモ
7 デルとして推奨されているものの 1 つになっている。また、化学物質審議会安全対策部会
8 安全対策小委員会のリスク評価の中でも利用実績がある²。

9

10 VII.2.2.4 数理モデルの概念

11 MNSEM は大気、水域、土壌、底質の 4 つの環境媒体から構成され、この 4 つの媒体間
12 の化学物質の出入等を表現した約 100 の数式から成り立っている。それぞれの環境媒体の
13 中では、化学物質の存在状態（水域であれば溶存態と懸濁粒子への吸着態）を分配平衡で
14 考慮している。また、それぞれの環境中濃度から農作物や畜産物中濃度を推計する式も組
15 み込まれ、人の摂取量まで推計できるようになっている。環境の大きさや温度、各媒体に
16 おける懸濁粒子等の濃度や密度、降雨量や平均風速等の各種の環境パラメータはデフォ
17 トで設定されている（詳細は付属資料 VII.5.2.1 (1)参照）。

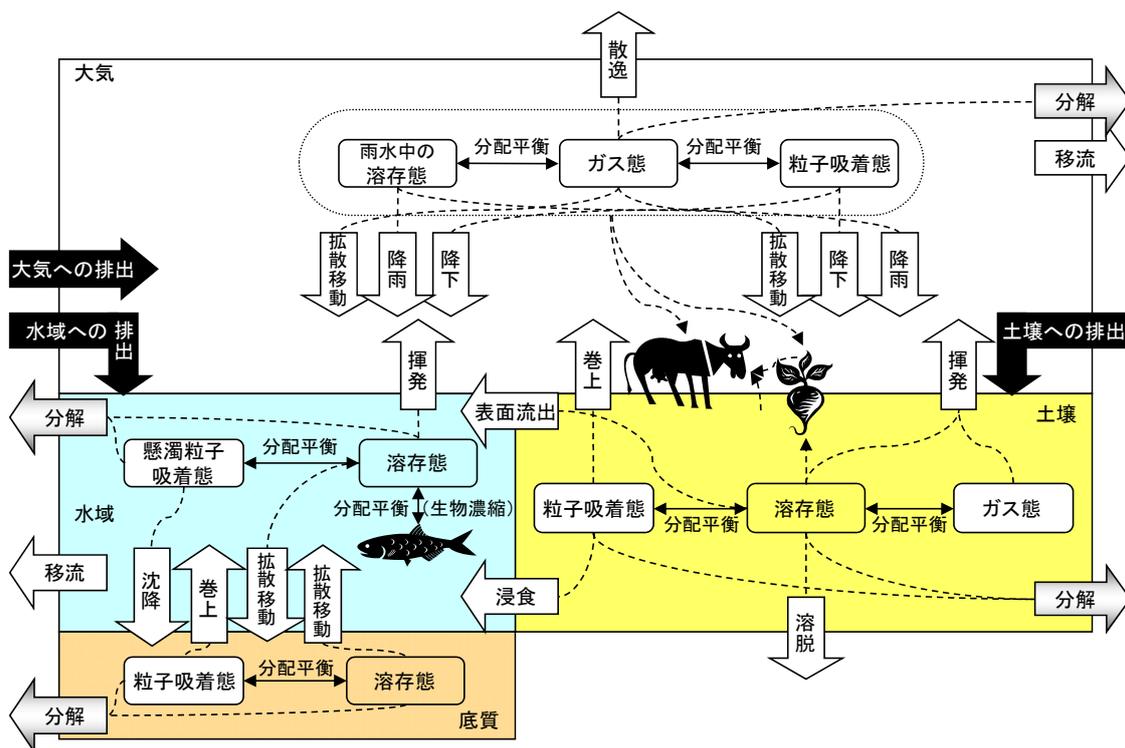
18 MNSEM の全体構成を図表 VII.4 に示す。

19

¹ MNSEM の開発者である吉田喜久雄氏より MNSEM3 β (MNSEM2 (version 2.0) の改良版) の提供を NITE が受け、本スキームの中で一部変更を加えて使用している。変更箇所については付属資料 VII.5.2.1 (2)に記載している。MNSEM に係る資料は以下のとおり。

- ・ 株式会社三菱化学安全科学研究所 (1998) Multi-phase Non-Steady state Equilibrium Model version 2.0 ユーザーズマニュアル。
- ・ 国立環境研究所が公開している MNSEM のページ <http://w-chemdb.nies.go.jp/mnsem2/MNSEM.htm>
- ・ Yoshida, K., T. Shigeoka and F. Yamauchi. (1987) Multi-Phase Non-steady State Equilibrium Model for Evaluation of Environmental Fate of Organic Chemicals, Toxicol. Environ. Chem. 15(3), 159-183.

² 例えば、化学物質審議会安全対策部会第 3 回安全対策小委員会 (2003) 参考資料 2 指定化学物質 100 トンを環境中に放出した場合のリスクの推定 (<http://www.meti.go.jp/kohosys/committee/summary/0001890/0001.html>)



図表 VII.4 MNSEM の全体構成－広域環境中の化学物質の挙動と物質収支－

図の中で、角丸の四角は化学物質の存在形態を表している。文字付きの矢印は速度論的に扱っている化学物質の動態を表し、このうち分解は物質自体の消失プロセスを、それ以外の白い矢印は媒体間もしくは系外（対象区画外）への輸送プロセスを表している。点線は化学物質の存在形態と分解・輸送のプロセスとの関係を示す。例えば土壌からの浸食（降水による土壌粒子の水域への輸送）は土壌中の粒子吸着態に係る輸送プロセスである。黒い矢印は各環境媒体への化学物質の排出を表す。

このモデルの主な仮定は以下のとおりである。

- ・ 各媒体は均一で化学物質は完全混合している。
- ・ 各媒体内の化学物質は存在形態間で分配平衡にある。

このようなモデルでは、以下のような物質収支式が基本となる。左辺は媒体 i 中における化学物質量 M_i の時間変化を示している。

$$\frac{dM_i}{dt} = Q + \left(\sum_j I_{j,i} - \sum_j A_{i,j} - k_i \right) \cdot M_i \quad \text{式 VII-1}$$

M_i : 媒体 i 中の化学物質量 [kg など]

Q_i : 媒体 i への化学物質の排出量 [kg/year など]

- 1 $I_{j,i}$: 隣接する媒体 j から媒体 i への化学物質の輸送流入速度定数 [1/year など]
 2 $A_{i,j}$: 媒体 i から隣接する媒体 j への化学物質の輸送流出速度定数 [1/year など]
 3 :
 4 k_i : 媒体 i における化学物質の分解の 1 次速度定数 [1/year など]
 5

6 式 VII-1 の式を 4 つの媒体ごとに 1 つずつ作成する。定常状態では左辺=0 と仮定する
 7 ことになり、化学物質量 M_i は 4 元連立方程式を解くことにより求めることができる。各媒
 8 体中の化学物質量 M_i を媒体の体積 V_i で除すことにより媒体中濃度が求められる。また、連
 9 立微分方程式を解析的に解くことにより、非定常状態における化学物質量を時間の関数と
 10 して求めることができる。非定常状態の式は残留性の評価 (VII.4) で利用する。

11

12 VII.2.2.5 数理モデルの適用

13 式 VII-1 の Q_i に対象化学物質の媒体別の排出量を入力することになる。製造数量等の届
 14 出情報に基づく場合は IV 章で推計した媒体別排出量を、PRTR 情報に基づく場合は IV.4.6
 15 で集計した媒体別排出量を入力する。

16 $A_{i,j}$, $I_{j,i}$ 及び k_i の推計に対象化学物質の物理化学的性状データと環境中の分解速度定数を
 17 用いる。前節 VII.2.1.2 で述べた①環境媒体間の分配比率、②人の摂取量の摂取媒体別比率
 18 は定常状態の仮定から推計する。人の摂取量の推計に関しては以下の点が排出源ごとの暴
 19 露シナリオと異なる。人の摂取量の推計に用いる 1 人当たりの摂取量の数値は VII.5.2.1 (1)
 20 ③を参照されたい。

21

- 22 ・ 本シナリオでは特定の排出源の影響下でない国内の一般環境を推計の対象としてい
 23 るため、農作物、牛肉、乳製品の 1 人当たりの摂取量 [g/day] に対し、自給率は加味す
 24 るが「近郊生産物摂取割合 (排出源を中心とする一定の領域に住む人が、その領域で
 25 栽培される農作物等を摂取する割合)」を加味しないこととする。
- 26 ・ 河川と海域を区別せずに水域としてまとめて扱っているため、魚介類 (淡水域) の 1
 27 人当たりの摂取量 [g/day] と魚介類 (海水域) の 1 人当たりの摂取量 [g/day] を合計した
 28 値を水域中の化学物質濃度に乗じて、魚介類経由の人の化学物質摂取量を推計する。
- 29 ・ 暴露推定に用いるモデルには技術的な限界があり、推定結果には大きな不確実性があ
 30 ることに留意する必要がある

31

1 VII.3 環境中濃度等の空間的分布の推計

2 ここでは様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオに適用する、地理情報を活用した数
3 理モデルを用いた環境中濃度等の全国的な空間分布の推計方法を説明する。

5 VII.3.1 環境多媒体モデル G-CIEMS

6 本節では、様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオにおいて環境中濃度等の空間的
7 分布を推計するために用いられる、環境多媒体モデル G-CIEMS (Grid-Catchment Integrated
8 Environmental Modeling System) ^{1,2,3}について解説する。

10 VII.3.1.1 環境多媒体モデル G-CIEMS に基づく環境中濃度等の空間的分布の推計

11 G-CIEMS は、国立環境研究所で開発された、詳細な空間分解能を持つ GIS 環境多媒体
12 モデルである。環境中に放出された化学物質は、大気、水、土壌、底質等の媒体の間を移
13 動あるいは分配され、大気に放出したものが粒子に吸着して地表面に沈着したり、あるい
14 は河川に排出された物質が揮発して大気に移動したりする。同時に、大気中の化学物質は
15 風に乗って移動することもあり、河川水中の化学物質は川の流れに乗って下流へ移動し、
16 また他の流域からの流れと合流して希釈される。

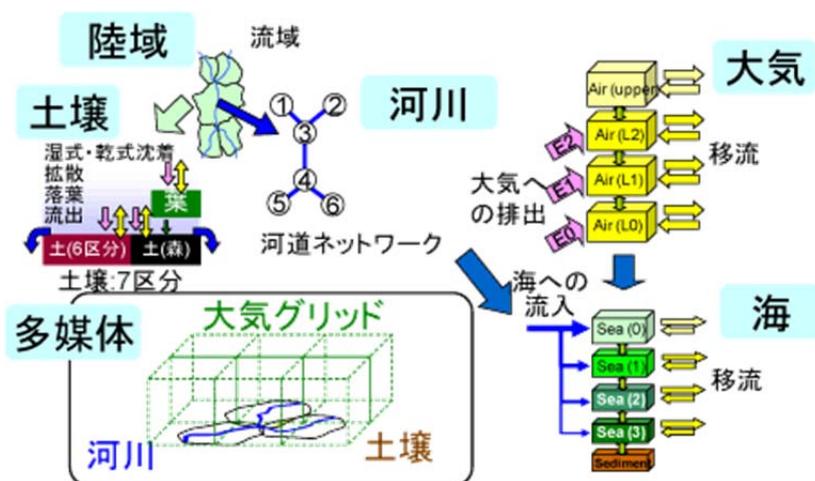
17 本モデルは、GIS（地理情報システム）で用いる地理データに基づき、このような多媒体
18 の媒体間の輸送と、大気、河川等での輸送との両方を同時に計算して、媒体間の輸送や分
19 配と地点間の輸送と同時に推定する環境モデルである。

20

1 国立環境研究所 環境リスク研究センターリスク管理戦略研究室、曝露評価関連シミュレーションモデル&ツール、http://www.nies.go.jp/rcer_expoass/gciems/gciems.html

2 Suzuki, N. *et al.*, Geo-Referenced Multimedia Environmental Fate Model (G-CIEMS). Model formulation and comparison to the generic model and monitoring approaches, *Environ. Sci. Technol.* 2004, 38, 5682-5693 (2004)

3 鈴木規之ら、全国河川の河道構造データに基づく化学物質の GIS 河川動態モデル (G-CIEMS) の開発と空間分布評価の試み、*環境化学*、15, 385-395 (2005)



図表 VII.5 多媒体モデル G-CIEMS

評価Ⅱでは、評価Ⅰと比べて評価対象物質が有する情報の多寡に応じて、複数の情報源や複数の推計手法を用いることとしている。

暴露評価Ⅱでは、地理的な情報を含む排出量情報が得られる場合、その情報を用いて、より詳細な数理モデルを用いた暴露評価を行うこととしている。この地理的な情報を含む排出量情報として「メッシュ排出量データ」が作成できる場合には、GIS 環境多媒体モデル G-CIEMS を用いて大気、水域、土壌、底質及び植生の環境中濃度の推計を行う。

G-CIEMS では、日本全国の大気メッシュ (3 次メッシュ又は 2.5 次 (5 倍地域メッシュ)) や河川・土壌の小流域単位への排出量を入力とし、それを図表 VII.5 に示すような環境中動態を考慮したモデルで評価することで、多媒体間の分配も考慮した空間的な濃度分布を推計する。メッシュ排出量データは、排出量推計 (IV 章を参照。) に示すように、例えば、対象物質の PRTR 情報の届出排出量や届出外排出量をもとに、媒体間の排出量の按分を考慮し、地図上の区画 (メッシュ) ごとに割り振ることで作成することができる。利用する排出量の詳細は、IV 章の様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオにおける排出量推計に関する記載を参照されたい。

この数理モデルの特徴は、広範な地域における非点源排出 (線源・面源) に分類される排出源であっても、その大気中の移流拡散や河川の上流から下流への移動等の空間的スケールと、長期的な水質・底質間の分配、土壌や植生への蓄積等の時間的スケールを含めた動態を評価できることである。この数理モデルで、十分に長い時間が経過し定常状態に到達した時の濃度を推計することにより、全国の各媒体への排出量を同時に考慮した濃度を評価することができる。

ここでは GIS 多媒体モデル G-CIEMS を用いて、以下の推計を行う。各項目の具体的な内容は本節の VII.3.1.2 以降で後述し、モデルについては次節 VII.3.2 と付属資料 VII.5.3 で説明する。

- 1 ・ 環境媒体中のメッシュ単位での濃度（大気）及び流域単位での濃度（水域、土壌、
- 2 底質、植生）
- 3 ・ 環境媒体中の流域又はメッシュ単位での人の摂取量
- 4 ・ 環境媒体中の流域単位での水生生物・底生生物の暴露濃度
- 5 ・ 環境媒体間の分配比率

6

7 VII.3.1.2 モデルの概要

8 (1) モデルの概要

9 本モデルは、標準的には別途既に公表されている河道構造データベース¹に基づき、日本
10 全国を

- 11 ・ 大気は約 5km グリッド（2.5 次メッシュ）又は約 1km のグリッド（3 次メッシュ）
- 12 ・ 地表面は平均 9.3km²ほどの小流域
- 13 ・ 河川は平均河道長 5.7km の河道

14 として扱う。

15 モデル内で計算する主な動態過程として

- 16 1. 大気については、大気グリッド間の移動と沈着、分解、地表面との交換などの過程。
- 17 2. 河川については、河道の水の流れにしたがっての流下と、河川内における分解、粒
- 18 子状物質との分配、底質への沈降、大気との交換などの過程。
- 19 3. 土壌については、小流域から対応する河道への流出、土壌内での分解、地下水への
- 20 移行、大気との交換などの過程。
- 21 4. 底質については、河川や湖沼の水との交換。

22 を記述している。大気グリッド毎の大気中の濃度及び河道毎の河川水中の濃度、小流域に
23 おける土壌中の濃度、底質の濃度を出力する。

24

25 (2) 数理モデルの概念

26 G-CIEMS の基礎的なモデルの考え方²は、Mackay のフガシティに基づく定式化を用い
27 ている。本モデルでは、環境コンパートメントを大気、表層水（河川及び湖沼）、底質（河
28 川及び湖沼）、土壌（土地利用区分別）及び植生とで構成している。

29 本モデルは、Mackay のフガシティモデルのレベル IV 相当（非平衡・非定常・開放系）
30 のダイナミック（時間変化も考慮する）モデルとして、排出量に基づく環境中濃度を計算

¹ 鈴木規之ら、環境動態モデル用河道構造データベース、国立環境研究所研究報告第 179 号 R-179(CD)-2003、国立環境研究所（2003）

² Noriyuki Suzuki *et. al.*, Geo-referenced multimedia environmental fate model(G-CIEMS): Model formulation and comparison to the generic model and monitoring approaches, *Environ. Sci. Technol.* 2004, 38, 5682-5693

1 することが可能であるが、時間変化に対するフガシティの変量が一定以下になるような擬
 2 定常状態¹として解くことにより、Mackay のフガシティモデルのレベル III 相当（非平衡・
 3 定常・開放系）を解くことができる。このレベル III とは、化学物質の排出量が一定のとき
 4 に無限時間後に到達する濃度に相当し、局所的な平衡と大域的な非平衡・定常の仮定によ
 5 って得られるものである。このレベル III 相当の結果は、化審法における継続的な環境への
 6 化学物質の排出に対する環境中濃度の評価に適していると考えられることから、このレベ
 7 ル III 相当の結果を評価に用いる。

8

9 VII.3.1.3 モデル入力データ

10 モデルに対する入力値としては

- 11 a. 環境への化学物質の排出量として、大気グリッド、小流域単位での土壌、河道単位
- 12 での河川それぞれへの排出量の入力。
- 13 b. 化学物質の物理化学的性状値。
- 14 c. 小流域、河道などの地理データ。
- 15 d. 気象、水文等のデータ。

16 が必要である。これらの入力値のうち、c、d については標準的なデータ²が用意されている。

17 a、b の排出量と物理化学的性状値については基本的に物質別に用意する。

18

19 VII.3.1.4 排出源ごとの暴露シナリオとの比較

20 環境 multimedia モデル G-CIEMS を用いた環境中濃度等の全国的な空間分布の推計では、約
 21 5km グリッド（2.5 次メッシュ）、約 1km のグリッド（3 次メッシュ）又は小流域単位に区
 22 分し、区分ごとに multimedia の媒体間の輸送と、大気、河川等での輸送との両方を同時に計算
 23 し環境中濃度を推定している。排出源ごとの暴露シナリオと空間分解能を持つモデルでの
 24 暴露状況の推計とで空間スケールや推計内容等を対比したものを図表 VII.6 に示す。

25 図表 VII.6 排出源ごとの暴露シナリオと空間分解能を持つモデルでの暴露状況の推計に
 26 における評価スケールや推計内容等の比較

	排出源ごとの暴露シナリオ	空間分解能を持つモデルでの暴露状況の推計
評価空間スケール	排出源の周辺半径 1～10km のエリア	5km メッシュ（1km メッシュも選択可能）、小流域単位
推計に必要な化学物質	<ul style="list-style-type: none"> ・ 物理化学的性状一式 ・ 排出源ごとの排出量（大気、水 	<ul style="list-style-type: none"> ・ 物理化学的性状一式 ・ メッシュや小流域ごとの排出量（大気、

¹ pseudo-steady-state

²鈴木規之ら、環境動態モデル用河道構造データベース、国立環境研究所研究報告第 179 号 R-179(CD)-2003、国立環境研究所（2003）に記載されてるものを利用している。

	排出源ごとの暴露シナリオ	空間分解能を持つモデルでの暴露状況の推計
の情報	域の媒体別) ・ 土壌中の分解速度 (又は半減期)	水域、土壌の媒体別) ・ 媒体ごと (大気、水域、土壌、底質) の分解速度 (又は半減期)
推計する内容	以下の項目について排出源周辺のエリア内平均値を推計 ・ 媒体別の環境中濃度 ・ 人の摂取量	評価空間スケール別に以下の項目について推計 ・ 媒体別の環境中濃度 ・ 人の摂取量
長所	・ 推計濃度は暴露シナリオの設定次第で排出源近傍の高濃度や高暴露集団の把握に適する	・ 推計濃度は各媒体で濃度の空間分布の把握に適する。 ・ モニタリング濃度との比較による、実態と推定の整合性を踏まえた評価に適する。
短所又は留意点	・ 大気への排出と水域への排出でシナリオが分かれ、媒体間移動の考慮は限定的 ・ 環境中での分解の半減期の考慮は土壌のみ	・ 他のモデルと比較して、計算が複雑である。

1

2 VII.3.2 モデルの特徴

3 VII.3.2.1 考慮する動態過程

4 本モデルでは、Mackay Multimedia Environmental Models – The Fugacity Approach
 5 で考慮されている動態過程を参考としてモデルを構築している¹。

6 本モデルにおいて考慮する動態過程を図表 VII.7～図表 VII.14 に示す。

7

8 (1) 大気メッシュ

9 大気は一定の区画がグリッド状に連なるメッシュとして定義しており、さらにそのメッ
 10 シュが図表 VII.8 に示すような複数の層を持つ構造としている。

11 化学物質は下層に排出されるものとし、気温、降水量等の気象条件を用い、移流・拡散
 12 項としてメッシュ間の移流をメッシュ境界における年間平均風速をもとに移動量を計算す
 13 るほか、河川、土壌等の地上区画との間での分配や沈着等の媒体間輸送を考慮する

14 大気メッシュにおいて考慮している動態過程を図表 VII.7 に示す。

15

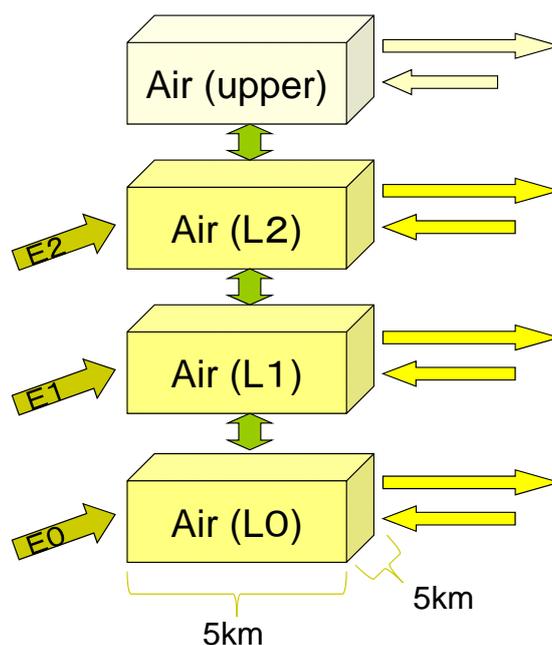
16 図表 VII.7 大気メッシュにおいて考慮している動態過程

種類	考慮している動態過程
生成・投入項	化学物質の大気への排出 (境界外からの流入)

¹ Donald Mackay, Multimedia Environmental Models – The Fugacity Approach, Second Edition (CRC Press LLC, 2001)

平衡分配項	粒子・蒸気分配
移流・拡散項	周辺の大気メッシュとの移流交換 大気の数層間の交換 水区画との交換（乾性沈着、湿性沈着、揮発、溶解） 土壌区画との交換（揮発、巻き上げ、乾性沈着、湿性沈着）
分解・消失項	大気中（蒸気相、粒子相）での分解 （境界外への流出）

1



2

3

図表 VII.8 大気区画の構造

4

5 (2) 水区画（河道）

6 水区画（河道）は、図表 VII.10 に示すような河道構造データベースの河道ネットワーク
 7 情報を用いて、上流から下流に至るまでの流路における計算等を行う。湖沼も面積をもつ
 8 河道として扱う。モデルでは単位流域を、河道と周囲の流域（土壌）の組み合わせで表し
 9 ており、河道とその周囲の流域は、ほぼ 1 対 1 の対応となっている。

10 化学物質は河川水中に排出されるものとし、GIS 上の河道ネットワーク上における移流・
 11 拡散と、水界内での平衡分配、底質及び大気からの沈着や分配等の媒体間輸送、土壌区画
 12 からの表面流出による流入等を考慮する。

13 水区画において考慮している動態過程を図表 VII.9 に示す。

14

15

16

1

2

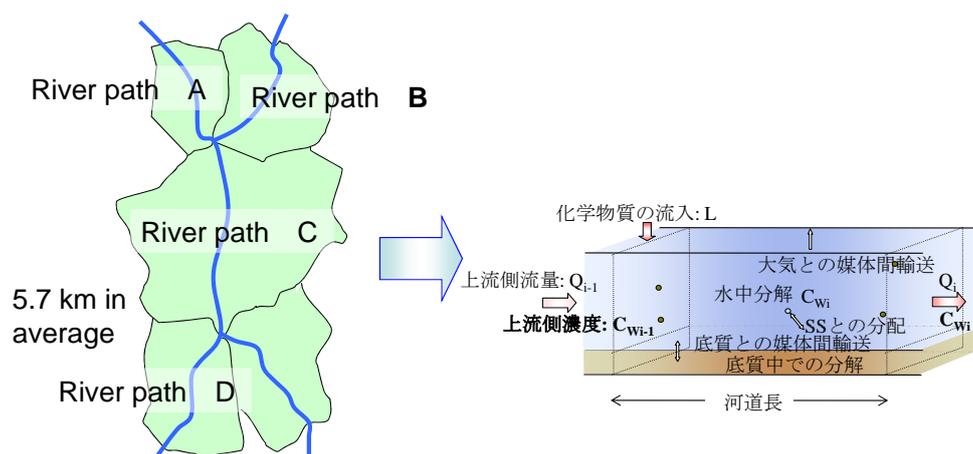
図表 VII.9 水区画において考慮している動態過程

種類	考慮している動態過程
生成・投入項	化学物質の水域への排出
平衡分配項	浮遊状粒子・溶解分配
移流・拡散項	大気メッシュとの交換（乾性沈着、湿性沈着、揮発、溶解） 上流からの流入・合流 下流への流出・分岐 土壌区画からの流入 底質区画との交換
分解・消失項	水域中（溶存態、粒子態）での分解

3

4

河道構造ネットワーク



5

6

図表 VII.10 水区画（河道）の構造

7

(3) 土壌区画及び植生区画

8

土壌区画は、土地利用区分別に 6 種類（水田、農耕地、灌木、非植生、市街地、その他）の土壌区画及び森林植生土壌区画で表されている。

10

また、森林植生区画は、森林植生土壌区画の上部にあるものとして表されている。

11

化学物質は土壌に排出されるものとし、土壌内での平衡分配、大気や植生との沈着や分配等の媒体間輸送、土壌区画からの表面流出による流出等を考慮する。土壌区画において考慮している動態過程を図表 VII.11 に、植生区画において考慮している動態過程を図表 VII.12 に示す。

15

1 図表 VII.11 土壌区画において考慮している動態過程

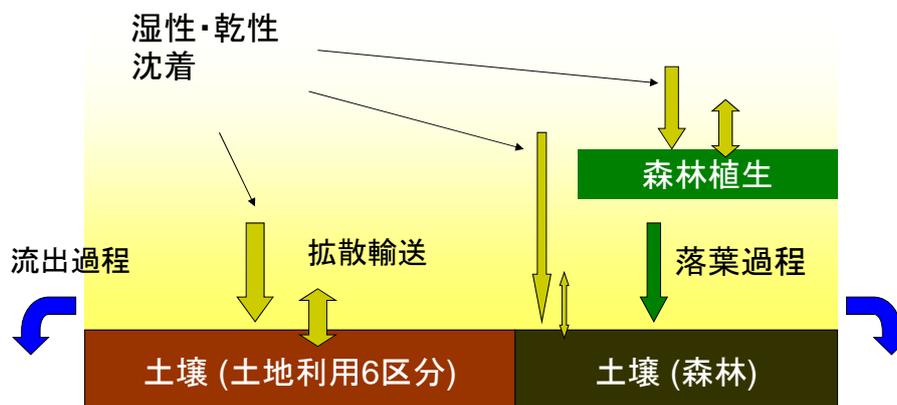
種類	考慮している動態過程
生成・投入項	化学物質の土壌への排出
平衡分配項	土壌粒子・間隙水／空気分配
移流・拡散項	大気メッシュとの交換（揮発、巻き上げ、乾性沈着、湿性沈着、植生との直接交換、植生（葉上）への乾性沈着、湿性沈着） 水区画への輸送（表土流出（runoff）、溶脱(leaching)、侵食(erosion)） 植生からの輸送（落葉）
分解・消失項	土壌バルク中での分解

2

3 図表 VII.12 植生区画において考慮している動態過程

種類	考慮している動態過程
生成・投入項	なし
平衡分配項	水／空気／有機炭素分配
移流・拡散項	大気メッシュとの交換（植生との直接交換、植生（葉上）への乾性沈着、湿性沈着） 土壌への輸送（落葉）
分解・消失項	植生バルク中での分解

4



5

6 図表 VII.13 土壌区画の構造

7

8 (4) 底質区画

9 底質区画は、水区画（河川）の下部にあるものとして表している。

10 底質区画において考慮している動態過程を図表 VII.14 に示す。

11

1 図表 VII.14 底質区画において考慮している動態過程

種類	考慮している動態過程
生成・投入項	なし
平衡分配項	粒子・間隙水分配
移流・拡散項	水区画との交換 地下水への溶出
分解・消失項	底質の埋没 底質バルク中での分解

2

3

4 (5) パラメータの設定

5 ① 河道ネットワーク構造

6 国立環境研究所の河道構造データベース¹を用いる。河道ネットワーク構造は、国土交通
7 省において整備された国土数値情報に基づき整理したものである。

8 また、湖沼は面積をもつ河道として扱う。

9

10 ② 環境パラメータ

11 水文学的パラメータについては、国立環境研究所の河道構造データベースを用いる。こ
12 のデータベースでは、50m メッシュ標高データより推定した河道勾配、流量年報等から推
13 定したデフォルト流量等を設定している。

14 気象条件については、大気メッシュ間の移流交換等を考慮する上で、各メッシュに風速
15 の年間平均値を設定している。

16

17 ③ 温度依存性パラメータ

18 G-CIEMS では蒸気圧、ヘンリー係数、オクタノール/水分配係数、各種分解速度定数に
19 ついて、計算する地点における気温を考慮した温度依存性の補正をした計算が可能である。

20 G-CIEMS では、気温 25℃における値を設定し、次章に示す温度依存性のパラメータを設
21 定して計算するものとする。

22

23 VII.3.2.2 モデル推計結果からの人の摂取量の算出

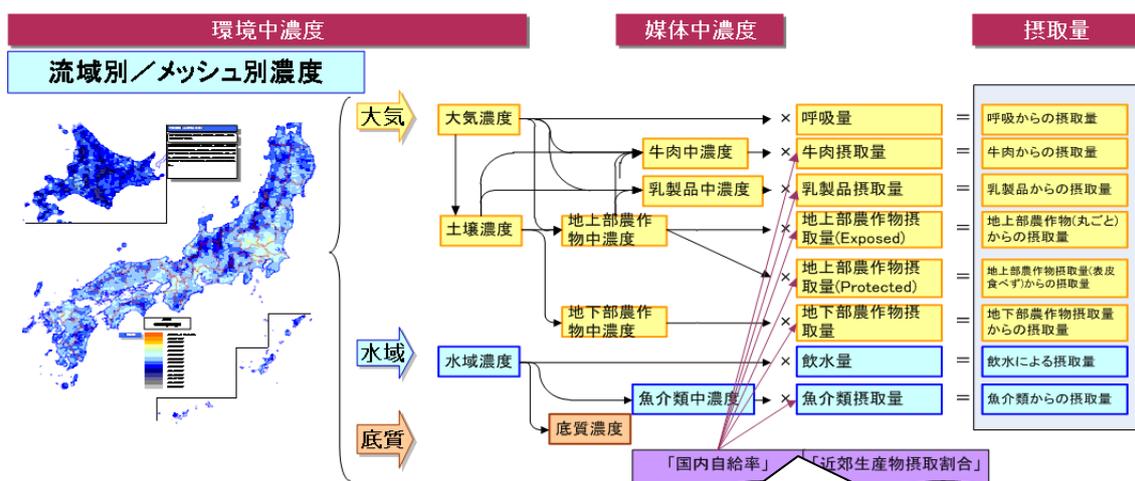
24 G-CIEMS によりメッシュごと・流域ごとの媒体別濃度が推定されるが、人への暴露量を
25 推定するためには、媒体別濃度から人の摂取量を算出する必要がある。モデルにより推計
26 された濃度から摂取媒体別の濃度を算出する手法の多くはV章と同様である。ただし、V

¹ 鈴木規之ら、環境動態モデル用河道構造データベース、国立環境研究所研究報告第 179 号 R-179(CD)-2003、国立環境研究所 (2003)

1 章の排出源ごとの暴露評価のモデルと異なり全国的な空間分布の推計が可能であるため、
2 当該流域における水域とその上空のメッシュ大気（流域上空にある複数メッシュにおける
3 最大濃度を示す大気）を経由した摂取（局所摂取量合計）以外に、その人が他の地域から
4 の媒体から化学物質を摂取する量の合計（広域摂取量合計）について考慮することができ
5 る。広域摂取量を考慮可能な摂取媒体は、他の地域から当該摂取媒体を摂取することが想
6 定される摂取媒体である農作物及び畜産物であり、排出源周辺の摂取（近郊生産物の摂取）
7 以外の摂取（一般環境）を用いる必要がある。このため、当該流域以外の流域の農作物や
8 畜産物について、流域面積に比例して平均的に摂取することを想定して、農作物（地上部
9 農作物、地下部農作物）及び畜産物（牛肉、乳製品）からの摂取量を算出する。計算の詳
10 細については、付属資料 VII.5.4 に記述する

11 環境中濃度と摂取媒体中濃度、摂取量との関係について、図表 VII.15 にまとめた。なお、
12 環境中濃度から媒体中濃度への推定や媒体摂取量による摂取量の算出などについては、
13 様々な仮定をおいた計算となっており、モデルに技術的な限界があることから推定結果に
14 は大きな不確実性があり、例えば個別地点の実態を必ずしも反映していない。

15



16

17 評価対象流域の濃度に基づく摂取以外に、評価対象流域以外の農作物及び畜産物からの摂取も考慮
18 する。

19 ○評価対象流域（及びその上空メッシュ）の環境媒体からの摂取

20 ・呼吸量、飲水量及び魚介類摂取量と、それらの濃度から、化学物質摂取量を算出。

21 ・近郊生産物分の農作物及び畜産物摂取量と、それらの濃度から、化学物質摂取量を算出。

22 ○評価対象流域以外の環境基準点を含む流域（及びその上空メッシュ）の環境媒体からの摂取

23 ・一般環境分の農作物及び畜産物摂取量と、評価対象流域以外の環境基準点を含む流域（及びその
24 上空メッシュ）の平均濃度から、化学物質摂取量を算出。

25

図表 VII.15 環境中濃度と摂取媒体中濃度、摂取量との関係

26

27

28

1 VII.4 残留性の評価

2 VII.4.1 目的等

3 リスク推計を目的として環境中濃度等の推計や人の摂取量を推計する暴露評価とは別に、
4 暴露評価Ⅱでは残留性の評価と呼ばれる評価も行う。これは化学物質の環境中での残留性
5 を評価することを目的とする。

6 化審法制定の契機となったポリ塩化ビフェニル (PCB) や残留性有機汚染物質 (POPs:
7 Persistent Organic Pollutants) のような難分解性の化学物質が大量に使用され環境中に放
8 出されると、環境中に長期間残留し環境汚染が長期間継続する。化審法においては、難分
9 解性かつ高濃縮性を有する化学物質は監視化学物質に指定され、優先評価化学物質から第
10 二種特定化学物質へのルートとは別途管理される。しかし、高濃縮性を有しない難分解性
11 の優先評価化学物質に対しても環境中の残留性を把握しておくことは、POPs のような環境
12 汚染を引き起こす可能性がある物質を見い出したり、環境中濃度の将来のトレンドを予測
13 するうえ等で役立つものと考えられる。

14 環境中の残留性を評価するには環境モニタリング情報を収集し媒体中の経年的な実際の
15 検出状況を確認する方法や、モデルを用いて残留性に関わる指標を推計する方法等がある。

16 以下では多媒体モデルを用いた環境中での残留性の評価手法について説明する。

17

18 VII.4.2 多媒体モデルの利用

19 OECD は環境残留性のある化学物質である POPs や難分解性・生物蓄積性・有害性物質
20 (PBT 物質: Persistent, Bio-accumulative and Toxic 物質) の環境中残留性と長距離移動
21 性を評価するためにも多媒体モデルの利用を推奨しており、その際に利用できるモデルを
22 **図表 VII.16** のように 5 種類 (一般的レベルⅡから大規模動的シミュレーション) に分類し
23 ている。本スキームでは、広域的・長期的スケールの暴露状況の推計 (VII.2.2.3) と同じ
24 く、MNSEM3β NITE 版 (**図表 VII.16** ではサイト特異的レベルⅢに該当する) を用いて
25 残留性を評価する。

26

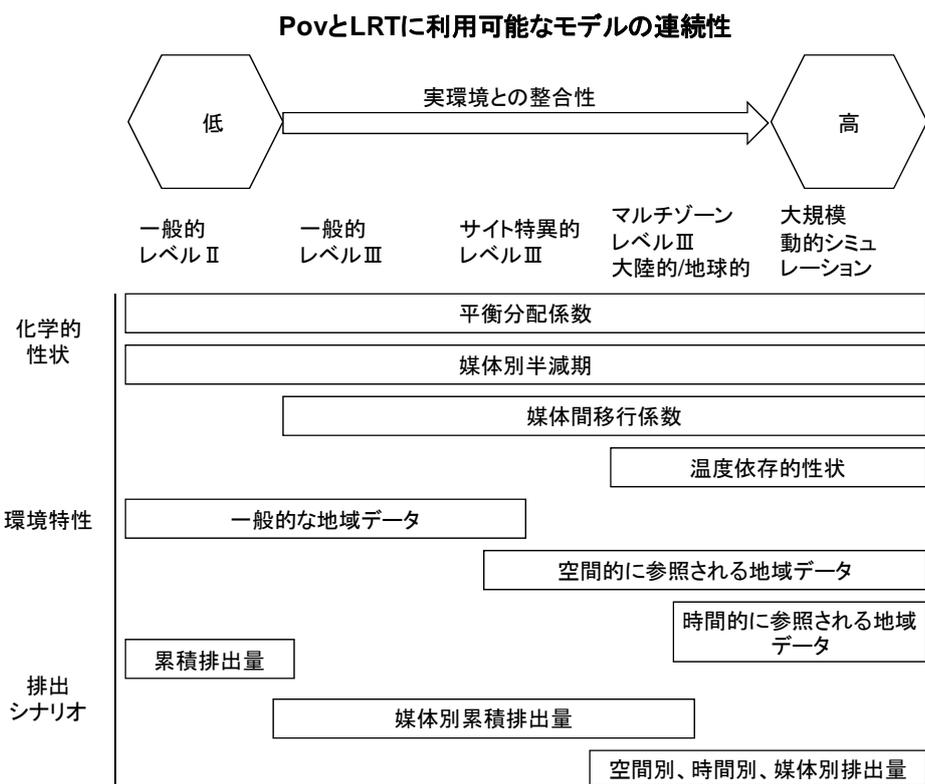


図3-1.PovとLRTIの推計に利用可能な多媒体環境運命モデルの連続性の説明

図表 VII.16 環境残留性(Pov)及び長距離移動性(LRTP)を評価するためのモデルタイプ¹

VII.4.2.1 推計項目

残留性の評価では、MNSEM3 β NITE 版を使って次の項目を残留性の指標として推計する。

- ・ 環境中での総括残留性 Pov (広域・定常状態における)
- ・ 定常状態到達時間

以下、順に説明する。

(1) 環境中での総括残留性

環境中での残留性の指標として総括残留性 Pov (overall persistence の略) というものを用いる。OECD の文書²において、Pov を用いて POPs の残留性を評価する方法が解説され

¹ OECD (2004) Guidance Document on the Use of Multimedia Models for Estimating Overall Environment Persistence and Long-Range Transport. OECD Series on Testing and Assessment No. 45. 3.2.3. Selecting the Appropriate Model

² OECD (2004) Guidance Document on the Use of Multimedia Models for Estimating Overall Environmental Persistence and Long-Range Transport. OECD Series on Testing and Assessment No. 45. 4.1.1 Persistence.

1 ている。ここでは、OECD の文書において提示されている計算式¹のうちの 1 つを、本スキ
2 ームで用いている多媒体モデル MNSEM3 β NITE 版に当てはめる。Pov の値が大きいほど
3 環境残留性が高いとみなせる。

4 Pov は、POPs と POPs ではない物質 (non-POPs) といった比較対照となる複数の
5 Reference chemical (対照物質) の数値と、評価対象物質の数値とを相対比較することによ
6 って評価する。POPs として第一種特定化学物質、non-POPs として第二種特定化学物質や
7 良分解性物質といったように、本スキームでは対照物質に分解性・蓄積性の観点から化審
8 法上の異なる区分の物質から複数選定する。これら対照物質の Pov と評価対象物質の Pov
9 とを比較することにより、残留性としてはいずれの区分の物質に類似するのかを概観でき
10 る。

11 (2) 定常状態到達時間

12 本項目では化学物質が定常状態 (ある媒体への化学物質の流入速度と消失速度がつりあ
13 った状態で、その流入速度の下では存在量に変化がない状態) に達する時間を媒体別に推
14 計する。本スキームでは定常時の化学物質の存在量の 99% に達する時間として計算する²。
15
16

17 VII.4.2.2 数理モデルの適用

18 総括残留性 Pov の値を求めるには、式 VII-2 のように、各媒体での定常状態の化学物質
19 量と各媒体での化学物質の減少速度を用いて計算する。ここで、VII.2.2.4 での式 VII-1 で
20 右辺=0 と仮定し、各媒体での定常状態の化学物質質量 M_i を求め、 A_{ij} 、 I_{ji} 及び k_i から各媒
21 体での化学物質の減少速度を求める。
22

$$\text{総括残留性 Pov} = \frac{\sum \text{各媒体での定常状態の化学物質質量}}{\{\sum (\text{各媒体での定常状態の化学物質質量} \times \text{各媒体での化学物質の減少速度})\}} \quad \text{式 VII-2}$$

23 Σ は全媒体 (大気相、水域相、土壌相、底質相) についての合計とする。

24 一方、定常状態到達時間を求めるには、VII.2.2.4 での式 VII-1 を時間の関数として解い
25 た式を用い、定常状態の化学物質の存在量の 99% に到達する時間を推計する。
26

¹ 上記の OECD の文書では Pov の計算上の定義として、定常状態における総残留時間と、クリアランス時間の 2 つが記載されているが、ここでは定常状態における総残留時間を用いる。なお、クリアランス時間に対しては VII.5.2.6 (2) を参照。

² 定常状態到達時間は残留性と正確に同一の指標ではないと考えられるが、対象物質に適用された多媒体モデルの時定数を反映することにより、対象物質を長期間環境に排出した場合のトレンドに関連する予測意義を持つと考えられる。

1 VII.5 付属資料

2 VII.5.1 はじめに

3 この付属資料では、様々な排出源の影響を含めた暴露シナリオで使用する数理モデルに
4 関して、具体的な数式やパラメーター式、それらの数式やパラメータを選択した経緯等を
5 収載する。

6 本編 (VII.4 までのこと) では数理モデルの概要をなるべく数式を使わない形で記載して
7 いたが、この付属資料では数理モデルを出来る限り数式を用いて正確な形で記載している。

8 必要に応じて本編と同じ説明を繰り返している箇所もあるが、全ての内容を再度説明し
9 ているわけではない。読者が本編の該当箇所に目を通していていることを前提にして記載して
10 いる点に留意されたい。

11

12 VII.5.2 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計と残留性の推計に用いる 13 数理モデル

14 ここでは、本編 VII.2 の広域的・長期的スケールの暴露状況の推計と、本編 VII.4 の残留
15 性の推計に用いる数理モデル MNSEM3 β NITE 版¹を説明する。

16

17 VII.5.2.1 数理モデルの概要

18 (1) モデル推計に用いる情報

19 MNSEM3 β NITE 版を用いたモデル推計に必要な情報と数値を以下に示す。

20

21 ① 化学物質の情報

22 MNSEM3 β NITE 版で使用する化学物質の情報を図表 VII.17 に示す。

23

24

¹ MNSEM の開発者である吉田喜久雄氏より MNSEM3 β (MNSEM2 (version 2.0) の改良版) の提供を NITE が受け、本スキームの中で一部変更を加えて使用している。変更箇所については後述の VII.5.2.1 (2) に記載している。MNSEM に係る資料等は以下のとおり。

- ・ 株式会社三菱化学安全科学研究所 (1998) Multi-phase Non-Steady state Equilibrium Model version 2.0 ユーザーズマニュアル。
- ・ 国立環境研究所が公開している MNSEM のページ <http://w-chemdb.nies.go.jp/mnsem2/MNSEM.htm>
- ・ Yoshida, K., T. Shigeoka and F. Yamauchi. (1987) Multi-Phase Non-steady State Equilibrium Model for Evaluation of Environmental Fate of Organic Chemicals, Toxicol. Environ. Chem. 15(3) 159-183.

1 図表 VII.17 MNSEM3 β NITE 版で用いる化学物質の情報

記号	説明	単位	出典・参照先※
<i>MW</i>	分子量	—	
<i>WS</i>	水溶解度	[mg/L]	
<i>VP</i>	蒸気圧	[Pa]	
<i>MP</i>	融点	[°C]	
<i>logPow</i>	1-オクタノールと水との間の分配係数	—	
<i>Henry</i>	ヘンリー係数	[Pa・m ³ /mol]	
<i>Koc</i>	有機炭素補正土壌吸着係数	[L/kg]	
<i>BCF</i>	生物濃縮係数	[L/kg]	
	大気中分解速度定数	[1/day]	
	水域中分解速度定数	[1/day]	
	土壌中分解速度定数	[1/day]	
	底質中分解速度定数	[1/day]	

2 ※ いずれの情報も評価の準備（I章）で選定された数値を用いる。

3

4 ② 環境条件の情報

5 MNSEM3 β NITE 版で使用する環境条件の情報を図表 VII.18 に示す。

6

7 図表 VII.18 MNSEM3 β NITE 版で用いる環境条件情報

記号	説明	単位	値	出典・参照先
<i>SUA</i>	評価環境面積	[m ²]	3.8×10 ¹¹	日本の陸地面積 ¹
<i>TEMP</i>	環境温度	[°C]	20	MNSEM UM ² デフォルト
<i>LLS</i>	陸地面積比	—	0.8	MNSEM UM デフォルト
大気コンパートメント				
<i>AFR</i>	風速	[m/sec]	2.0	※1
<i>TRF</i>	降水量(年間)	[mm/year]	1500	MNSEM UM デフォルト
<i>DEPA</i>	大気コンパートメントの高さ	[m]	200	MNSEM UM デフォルト
<i>CAER</i>	浮遊粒子濃度	[mg/m ³]	0.03	MNSEM UM デフォルト
<i>DEN_{AER}</i>	浮遊粒子密度	[kg/m ³]	1500	MNSEM UM デフォルト
<i>DAER</i>	浮遊粒子径	[μm]	10	MNSEM UM デフォルト
水域コンパートメント※2				
<i>DEP_W</i>	水域深度	[m]	10	MNSEM UM デフォルト
<i>CWSS</i>	懸濁粒子の濃度	[mg/L]	50	MNSEM UM デフォルト
<i>CWB</i>	水生生物の濃度	[mg/L]	5	MNSEM UM デフォルト
<i>OC_{SS}</i>	懸濁粒子有機炭素含有率	—	0.1	REACH-TGD ³ Chapter R.16.6.4. Table R.16-9 ※3
<i>KWAD</i>	水域移流速度定数	[1/day]	0.1	MNSEM UM デフォルト
<i>KSV</i>	懸濁粒子沈降速度	[m/day]	0.5	MNSEM UM デフォルト

1 総務省統計局「日本の統計 2009」(<http://www.stat.go.jp/data/nihon/index.htm>)

2 三菱化学安全科学研究所(1998) Multi-phase Non-Steady state Equilibrium Model version 2.0 ユーザーズマニュアル (以下 MNSEM UM と呼ぶ)

3 ECHA (2010) Guidance on information requirements and chemical safety assessment chapter r.16: environmental exposure estimation, version: 2

記号	説明	単位	値	出典・参照先
土壌コンパートメント				
<i>DEP_{SO}</i>	土壌相深度	[m]	0.2	MNSEM UM デフォルト
<i>SOAF</i>	土壌空気容積比	—	0.2	MNSEM UM デフォルト
<i>SOWF</i>	土壌水容積比	—	0.3	MNSEM UM デフォルト
<i>OC_{SOS}</i>	土壌粒子有機炭素含有率	—	0.04	MNSEM UM デフォルト
<i>DEN_{SOS}</i>	土壌粒子密度	[kg/L]	1.5	MNSEM UM デフォルト
<i>ETP</i>	土壌水分蒸散率	—	0.35	MNSEM UM デフォルト
<i>ERS</i>	土壌侵蝕速度	[m/year]	0.0002	MNSEM UM デフォルト
底質コンパートメント				
<i>DEP_{SE}</i>	底質相深度	[m]	0.05	MNSEM UM デフォルト
<i>POSE</i>	底質水容積比	—	0.75	MNSEM UM デフォルト
<i>OC_{SES}</i>	底質粒子有機炭素含有率	—	0.1	REACH-TGD デフォルト※3
<i>DEN_{SES}</i>	底質粒子密度	[kg/L]	2	MNSEM UM デフォルト

1 ※1 1994 年度から 2003 年度までの全国約 800 地点のアメダス気象観測データの中央値を求めた。

2 ※2 MNSEM UM のマニュアルでは表層水と呼んでいるが、ここでは水域という表現で統一する。

3 ※3 排出源ごとの暴露シナリオ（V 章参照）では底質中濃度を推計する際に懸濁粒子の性状を用いる
4 REACH-TGD の手法を利用している。ここでの懸濁粒子有機炭素含有率の値もそれに合わせた。

5

6 ③ 食品摂取量の情報

7 MNSEM3 β NITE 版で使用する食品摂取量等の情報を図表 VII.19 に示す。これらの値
8 の設定の経緯等については V 章の食品摂取量等の設定の経緯に関する記載を参照のこと。

9

10 図表 VII.19 MNSEM3 β NITE 版で用いる食品摂取量等の情報

説明	単位	値	出典・参照先
人の体重	[kg]	50	V.7.5.5 (2)①
人の吸入摂取量（大気）	[m ³ /day]	20	V.7.5.5 (2)②
人の地下部農作物の摂取量	[g/day]	163.7	V.7.5.5 (2)③
人の地上部農作物(Protected)の摂取量	[g/day]	240.8	V.7.5.5 (2)③
人の地上部農作物(Exposed)の摂取量	[g/day]	204.7	V.7.5.5 (2)③
人の乳製品の摂取量	[g/day]	72.4	V.7.5.5 (2)④
人の牛肉の摂取量	[g/day]	9.4	V.7.5.5 (2)④
人の魚介類の摂取量	[g/day]	45.3	V.7.5.5 (2)⑤
人の飲水量	[L/day]	2	V.7.5.5 (2)⑥

11

12 (2) MNSEM3 β NITE 版の変更点

13 MNSEM3 β NITE 版において、オリジナルの MNSEM2 から変更した箇所は以下のとお
14 りである。

15

①環境条件及び食品摂取量等

前述したように環境条件と食品摂取量等は図表 VII.18 と図表 VII.19 の値を用いる。

②農作物中濃度の推計

暴露評価と同じく、農作物を地下部農作物、地上部農作物 (Exposed)、地上部農作物 (Protected) に分けて、農作物中濃度推計式を排出源ごとの暴露シナリオで示した推計式 (V 章の農作物中濃度の推計に関する記載を参照) に変更した。この結果、地上部農作物 (Exposed) でのガス態の化学物質の取り込み期間は排出源ごとの暴露シナリオと同じく 60 日に制限していることになる。

ただし、媒体中濃度等 (大気中濃度、大気中における粒子吸着態とガス態存在割合、大気からの沈着量、土壌間隙水中濃度) の推計は MNSEM2 と同じである。

③分解速度定数

分解速度定数は MNSEM2 に組み込まれている推計式を用いるのではなく、物質ごとに文献等から収集した値を用いることとした。分解速度の収集・選定の方法等は I 章を参照。

④牛肉及び乳製品の生物移動係数

牛肉及び乳製品の生物移動係数は $\log Pow$ の関数であるが、排出源ごとの暴露シナリオと同じく、EUSES III.5.2.3.を参考に牛肉は「 $1.5 < \log Pow < 6.5$ 」、乳製品は「 $3 < \log Pow < 6.5$ 」という制限を設けた (「V.7.3.4 畜産物中濃度の推計」参照)。制限を超えた場合は上限値または下限値に置き換えた。

⑤飲料水中濃度の推計

飲料水中濃度の推計に用いる水域中濃度は排出源ごとの暴露シナリオと同じく、溶存態濃度とした (「V.7.3.5 (1) 河川水中濃度 (人の健康評価)))。

⑥魚介類中濃度の推計

排出源ごとの暴露シナリオと同様に BMF (「V.7.3.5 (2) 魚介類中濃度」参照) を考慮して推計することとした。

⑦土壌の非意図的摂取

土壌の非意図的摂取は本スキームの暴露シナリオに含まないため考慮しなかった。

VII.5.2.2 推計方法

MNSEM3 β NITE 版を用いて推計する項目は以下の 4 種類である。

- 1 ・ 環境媒体間の分配比率（広域・定常状態における）（本編 VII.2）
- 2 ・ 人の摂取量の摂取媒体別比率（広域・定常状態における）（本編 VII.2）
- 3 ・ 環境中での総括残留性（広域・定常状態における）（本編 VII.4）
- 4 ・ 定常状態到達時間（本編 VII.4）

5

6 これらを推計する目的等については本編の該当箇所を参照されたい。以下では上記推計
7 項目について MNSEM3 β NITE 版を用いた具体的な推計方法について順に説明する。

8

9 VII.5.2.3 環境媒体間の分配比率（広域・定常状態における）

10 MNSEM3 β NITE 版では、大気、水域、土壌及び底質の 4 種類の相（環境媒体）で構成
11 される環境中での化学物質の物質収支は式 VII-3 の 4 元連立 1 次微分方程式で表される。
12 上から順に大気相、水域相、土壌相、底質相の物質収支を表している。

13 係数 $A(1,1) \sim A(4,4)$ は 1 が大気相、2 が水域相、3 が土壌相、4 が底質相を示すものとし、
14 $A(i,j)$ は j 相から i 相へ化学物質が移行する際の 1 次速度定数に相当する。また、 i と j が同
15 じ相の場合には、その相における損失の 1 次速度定数に相当する。時間 t に依存するのは式
16 VII-3 の MSA 、 MSW 、 $MSSO$ 、 $MSSE$ であり、係数 $A(1,1) \sim A(4,4)$ や排出量 $TEMA$ 、 $TEMW$ 、
17 $TEMS$ は定数である。また、係数 $A(1,1) \sim A(4,4)$ は排出量 $TEMA$ 、 $TEMW$ 、 $TEMS$ に依
18 存しない。

19

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dMSA}{dt} = TEMA + A(1,1) \times MSA + A(1,2) \times MSW + A(1,3) \times MSSO + A(1,4) \times MSSE \\ \frac{dMSW}{dt} = TEMW + A(2,1) \times MSA + A(2,2) \times MSW + A(2,3) \times MSSO + A(2,4) \times MSSE \\ \frac{dMSSO}{dt} = TEMS + A(3,1) \times MSA + A(3,2) \times MSW + A(3,3) \times MSSO + A(3,4) \times MSSE \\ \frac{dMSSE}{dt} = A(4,1) \times MSA + A(4,2) \times MSW + A(4,3) \times MSSO + A(4,4) \times MSSE \end{array} \right.$$

式 VII-3

20

21 式 VII-3 は行列を使って書き直すと以下のようになる。

22

$$\frac{d}{dt} M = I + A \cdot M \quad \text{式 VII-4}$$

23

24 ただし、 $M = \begin{pmatrix} MSA \\ MSW \\ MSSO \\ MSSE \end{pmatrix}$ 、 $I = \begin{pmatrix} TEMA \\ TEMW \\ TEMS \\ 0 \end{pmatrix}$ 、 $A = (A(i, j))_{i=1 \dots 4, j=1 \dots 4}$ である。

1

2

記号	説明	単位	値	出典・参照先
<i>MSA</i>	大気相中の化学物質質量	g		MNSEM UM 3.5
<i>MSW</i>	水域相中の化学物質質量	g		MNSEM UM 3.5
<i>MSSO</i>	土壌相中の化学物質質量	g		MNSEM UM 3.5
<i>MSSE</i>	底質相中の化学物質質量	g		MNSEM UM 3.5
<i>TEMA</i>	大気相への化学物質排出量	g/day		IV章
<i>TEMW</i>	水域相への化学物質排出量	g/day		IV章
<i>TEMS</i>	土壌相への化学物質排出量	g/day		IV章
<i>M</i>	化学物質質量ベクトル	—		
<i>I</i>	排出量ベクトル	—		
<i>A</i>	媒体間の移行を表す遷移行列	—		

3

4 係数 $A(i,j)$ が表す媒体内・媒体間の具体的な内容は図表 VII.20 の示すとおりである。な
5 お、内容が「なし」となっているものはその媒体間の移行等を考えていないことを示す。

6 係数 $A(1,1) \sim A(4,4)$ の具体的な数式は MNSEM UM を参照されたい。

7

8

図表 VII.20 各係数が表す媒体内・媒体間の内容

係数	内容
A(1,1)	大気相ガス態：移流、分解、水域相への拡散、土壌相への拡散、散逸 大気相溶存態：移流、水域相への降雨、土壌相への降雨 大気相粒子吸着態：移流、水域相への降下、土壌相への降下
A(1,2)	水域相溶存態：大気相への揮発
A(1,3)	土壌相ガス態：大気相への拡散 土壌相溶存態：大気相への揮発 土壌相粒子吸着態：大気相への巻上げ
A(1,4)	なし
A(2,1)	大気相ガス態：水域相への拡散 大気相溶存態：水域相への降雨 大気相粒子吸着態：水域相への降下
A(2,2)	水域相溶存態：移流、分解、大気相への揮発、底質相への拡散 水域相粒子吸着態：移流、底質相への沈降
A(2,3)	土壌相溶存態：水域相への表面流出 土壌相粒子吸着態：水域相への侵食
A(2,4)	底質相溶存態：水域相への拡散 底質相粒子吸着態：水域相への巻上げ
A(3,1)	大気相ガス態：土壌相への拡散 大気相溶存態：土壌相への降雨 大気相粒子吸着態：土壌相への降下
A(3,2)	なし
A(3,3)	土壌相ガス態：大気相への揮発

係数	内容
	土壌相溶存態：大気相への揮発、分解、水域相への表面流出、溶脱 土壌相粒子吸着態：分解、大気相への巻上げ、水域相への侵食
A(3,4)	なし
A(4,1)	なし
A(4,2)	水域相溶存態：底質相への拡散 水域相粒子吸着態：底質相への沈降
A(4,3)	なし
A(4,4)	底質相溶存態：分解、水域相への拡散 底質相粒子吸着態：分解、水域相への巻上げ

1

2 定常状態における化学物質量は、式 VII-3 において $dMSA/dt = dMSW/dt = dMSSO/dt = dMSSE/dt = 0$ (または式 VII-4 で $0=I+A \cdot M$) とした 4 元連立 1 次方程式を解くこと
3
4
5
6

7
8
9
10
11

0= $I+AM$ の両辺を k 倍すると $0=kI+A(kM)$ となり、 I と M を各々 k 倍しても式が成立することから、 $MSA : MSW : MSSO : MSSE$ の比は媒体別の排出量の比である $TEMA : TEMW : TEMS$ に依存し、媒体別の排出量の比が同じであれば排出量の大きさ自体には依存しないことがわかる。

10

11 VII.5.2.4 人の摂取量の摂取媒体別比率（広域・定常状態における）

12 VII.5.2.3 で求めた媒体中の存在量を媒体の体積で除することにより、媒体中濃度を求め
13
14
15

16
17
18
19

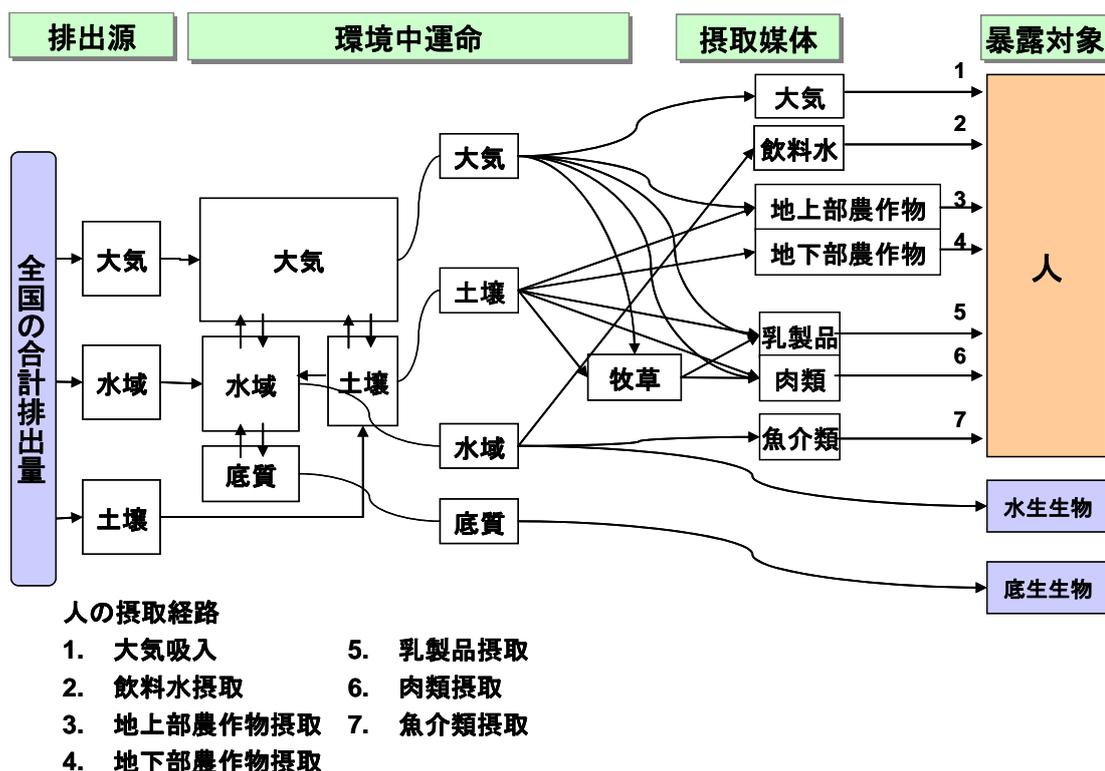
人の摂取媒体別の摂取量比率を推定するにあたり、設定した暴露シナリオを図表 VII.21 に示す。摂取経路は排出源ごとの暴露シナリオの場合と基本的には同じである。排出源ごとの暴露シナリオと異なる点は、広域的・長期的スケールの暴露状況の推計では大気と水域の間における物質の移動を考慮するため、水域にのみ排出があった場合でも大気吸入や農作物摂取等がある点と、水域は河川と海域を区別せずまとめて扱っている点がある。

20
21
22
23
24
25

また、人の摂取量の推計に関しては、農作物、牛肉、乳製品の 1 人当たりの摂取量[g/day]に自給率は加味するが「近郊生産物摂取割合（排出源を中心とする一定の領域に住む人が、その領域で栽培される農作物や畜産物を摂取する割合）」を加味しない点や、淡水魚の 1 人当たりの摂取量[g/day]と海水魚の 1 人当たりの摂取量[g/day]を合計した値を用いる点が排出源ごとの暴露シナリオと異なる。それらの点を考慮した 1 人当たりの摂取量の具体的な値[g/day]は前述の図表 VII.19 を参照。

26
27
28
29

なお、環境媒体間の分配比率と同様に、摂取量比率についても媒体別の排出量の比である $TEMA : TEMW : TEMS$ に依存し、媒体別の排出量の比が同じであれば排出量の大きさ自体には依存しない。



図表 VII.21 MNSEM3β NITE 版における人の摂取経路

VII.5.2.5 環境中での総括残留性（広域・定常状態における）

環境中での残留性を評価するため、OECD の文書¹で残留性有機汚染物質（POPs）の残留性評価の指標として用いられている総括残留性 Pov (overall persistence の略) を求める。OECD の文書で提示されている Pov の計算式（総残留時間の式）を MNSEM3β NITE 版に当てはめると式 VII-5 のようになる。A(1,1)、A(2,2)、A(3,3)、A(4,4)は式 VII-3 と同じである。

MSA : MSW : MSSO : MSSE の比は媒体別の排出量の比である TEMA : TEMW : TEMS に依存する (VII.5.2.4 参照) から、式 VII-5 から明らかなように Pov も媒体別の排出量の比である TEMA : TEMW : TEMS に依存し、媒体別の排出量の比が同じであれば排出量の大きさ自体には依存しない。

$$Pov = - \frac{MSA + MSW + MSSO + MSSE}{MSA \times A(1,1) + MSW \times A(2,2) + MSSO \times A(3,3) + MSSE \times A(4,4)} \quad \text{式 VII-5}$$

¹ OECD (2004) Guidance Document on the Use of Multimedia Models for Estimating Overall Environmental Persistence and Long-Range Transport. OECD Series on Testing and Assessment No. 45.

1

記号	説明	単位	値	出典・参照先
<i>Pov</i>	総括残留性	[day]		文献 ¹
<i>MSA</i>	定常状態の大気相中の化学物質質量	[g]		VII.5.2.3
<i>MSW</i>	定常状態の水域相中の化学物質質量	[g]		VII.5.2.3
<i>MSSO</i>	定常状態の土壌相中の化学物質質量	[g]		VII.5.2.3
<i>MSSE</i>	定常状態の底質相中の化学物質質量	[g]		VII.5.2.3
<i>A(1,1)</i>	大気相における減少速度※	[1/day]		式 VII-3
<i>A(2,2)</i>	水域相における減少速度※	[1/day]		式 VII-3
<i>A(3,3)</i>	土壌相における減少速度※	[1/day]		式 VII-3
<i>A(4,4)</i>	底質相における減少速度※	[1/day]		式 VII-3

2 ※ 負の値であるため、式 VII-5 の右辺にマイナスを乗じている。

3

4 VII.5.2.6 定常状態到達時間

5 (1) 定常状態到達時間の推計方法

6 ① 手順

7 定常状態の化学物質の存在量の 99% に到達する時間（定常状態到達時間）を推計する手
8 順は以下のとおりである。9 まず、任意の時刻 t における化学物質質量を式 VII-3 の微分方程式を解いて求める。式
10 VII-3 は 1 階 1 次連立微分方程式なので、微分方程式の理論によると解を解析的に求めるこ
11 とができる（後述の②を参照）。したがって、 i 相における定常状態における化学物質質量を
12 M_i 、微分方程式を解いて求めた時刻 t における化学物質質量を $M_i(t)$ とする（時刻 0 では化学
13 物質質量は 0、すなわち $M_i(0)=0$ とする）。定常状態の化学物質質量に対する時間 t における化
14 学物質質量の比は $M_i(t)/M_i$ となる。この比が 0.99 になる時の時刻 t を数値計算的に逆算す
15 る。16 なお、 $M_i(t)/M_i$ の値は時間 t が同じであれば、排出量の比である $TEMA: TEMW: TEMS$
17 に依存し、排出量の大きさ自体には依存しない。この理由は以下のとおりである。18 式 VII-4 の $dM/dt=I+A \cdot M$ の両辺を k 倍すると $d(kM)/dt=kI+A(kM)$ が成り立つ
19 ことから、媒体別の排出量の比を保ったまま排出量を k 倍した場合、時間 t における化学物
20 質質量 $M_i(t)$ は k 倍になる。また、定常状態の化学物質質量 M_i も同じく k 倍となる (VII.5.2.3 参
21 照)。したがって $(kM_i(t)) / (kM_i) = M_i(t)/M_i$ となり、排出量を k 倍する前と同じであ
22 る。

23

¹ Frank Wania and Donald Mackay (2000) A Comparison of Overall Persistence Values and Atmospheric Travel Distances Calculated by Various Multi-Media Fate Models. WECC Wania

1 ② (参考) 任意の時刻 t における化学物質量の導出

- 2 以下では参考までに微分方程式を解析的に解いて任意の時刻 t における化学物質量を導
3 出する方法を説明する。

■ 次の微分方程式を解く (M を時刻 t の式で表す)

$$\frac{d}{dt}M = I + A \cdot M$$

M : 化学物質量ベクトル、 I : 排出量ベクトル、 A : 媒体間の移行を表す遷移行列
詳しくは VII.5.2.4 の式 VII-3、式 VII-4、図表 VII.20 を参照。

ただし、簡単にするために VII.5.2.4 と違い、 $M = \begin{pmatrix} M_1 \\ M_2 \\ M_3 \\ M_4 \end{pmatrix}$ 、 $I = \begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \\ I_4 \end{pmatrix}$ と表記する。

$A = UA'U^{-1}$ なる行列 U が存在する場合を考える (U の算出方法は後述)。

A' は対角行列、 $UU^{-1} = E$ とする。

ここで、 $E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ 、 $A' = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4 \end{pmatrix}$

このことを用いて、行列 A を対角化し、微分方程式を解く。

$$\frac{d}{dt}M = I + UA'U^{-1}M$$

左から U^{-1} を乗じる。

$$\frac{d}{dt}U^{-1}M = U^{-1}I + A'U^{-1}M$$

ここで、 $U^{-1}M \equiv M'$ 、 $U^{-1}I \equiv I'$ とする。

$$\Rightarrow \frac{d}{dt}M' = I' + A'M'$$

この微分方程式の右辺の行列の要素は対角成分のみであるので、成分ごとに独立した微分方程式となる。

$$\begin{pmatrix} \frac{d}{dt} M'_1 \\ \frac{d}{dt} M'_2 \\ \frac{d}{dt} M'_3 \\ \frac{d}{dt} M'_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I'_1 + \lambda_1 M'_1 \\ I'_2 + \lambda_2 M'_2 \\ I'_4 + \lambda_3 M'_3 \\ I'_3 + \lambda_4 M'_4 \end{pmatrix} \quad \text{ただし、} M'_i, I'_i \text{ (} i=1,2,3,4 \text{) はそれぞれ } M', I' \text{ の成分}$$

各成分の微分方程式

$$\frac{d}{dt} M'_i = I'_i + \lambda_i M'_i \quad (i=1,2,3,4) \quad \text{を解く。}$$

どの成分でも解き方は同様なので、簡単にするために「'」と「i」を省略すると

$$\frac{d}{dt} M = I + \lambda M \quad \text{式 VII-6}$$

$$I + \lambda M \equiv \bar{M} \quad \text{と置くと、} M = \frac{-I + \bar{M}}{\lambda}$$

$$\text{式 VII-6 に代入すると、} \frac{d}{dt} \left(\frac{-I + \bar{M}}{\lambda} \right) = \bar{M}$$

$$\text{よって、} \frac{1}{\lambda} \frac{d\bar{M}}{dt} = \bar{M}$$

$$\Rightarrow \int \frac{d\bar{M}}{\bar{M}} = \lambda \int dt + \text{cons.} \quad (\text{cons. は積分定数})$$

$$\Rightarrow \ln \bar{M} = \lambda t + \text{cons.}$$

$$\Rightarrow \bar{M} = \text{cons.} \times \exp(\lambda t)$$

$$\Rightarrow M = \frac{-(I - \text{cons.} \times \exp(\lambda t))}{\lambda} \quad \text{式 VII-7}$$

初期値条件を考えると、

$$M|_{t=0} = \frac{-(I - \text{cons.})}{\lambda} = 0 \Rightarrow \text{cons.} = I$$

$$\therefore M = -(1 - \exp(\lambda t)) \frac{I}{\lambda}$$

したがって、各成分を並べると

$$M' = \begin{pmatrix} -(1 - \exp(\lambda_1 t)) \frac{I'_1}{\lambda_1} \\ -(1 - \exp(\lambda_2 t)) \frac{I'_2}{\lambda_2} \\ -(1 - \exp(\lambda_3 t)) \frac{I'_3}{\lambda_3} \\ -(1 - \exp(\lambda_4 t)) \frac{I'_4}{\lambda_4} \end{pmatrix} \quad \text{式 VII-8}$$

最後に M' を U で戻す必要がある。

$M = UM'$ これを計算すれば最終的に M が求められる。

■次に、具体的な U, U^{-1} の算出方法について説明する。

$$A = UA'U^{-1} \quad (\Leftrightarrow A' = U^{-1}AU) \quad A' \text{ は対角行列で、} U^{-1} \text{ は } U \text{ の逆行列}$$

これらは、以下のように固有値、固有ベクトルから求めることができる。

$$\begin{cases} Av_1 = \lambda_1 v_1 \\ Av_2 = \lambda_2 v_2 \\ Av_3 = \lambda_3 v_3 \\ Av_4 = \lambda_4 v_4 \end{cases} \quad \lambda_i \text{ は固有値、} v_i \text{ は } A \text{ の固有ベクトルである}^1. (i=1,2,3,4)$$

ここでは $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$ は相異なる固有値²とする。

U は固有ベクトルを並べたものとすればよい。

$$U = (v_1 \quad v_2 \quad v_3 \quad v_4) \quad \text{式 VII-9}$$

最後に $U^{-1}AU$ が確かに対角行列になることを示しておく。

¹ 固有値、固有ベクトルを数値計算的に求める無料のソフトウェアには例えば、PopTools という Microsoft® Excel 用のアドインソフトがある。 <http://www.poptools.org/>

² このとき 4 つの固有ベクトルは 1 次独立となるため、 U は逆行列 U^{-1} を持ち、 A は必ず対角行列にできる。4 つの固有ベクトルが 1 次独立にならない場合の扱いは線形代数学の教科書等を参照されたい。

$$\begin{aligned}
 AU &= A(v_1 \ v_2 \ v_3 \ v_4) \\
 &= (Av_1 \ Av_2 \ Av_3 \ Av_4) \\
 &= (\lambda_1 v_1 \ \lambda_2 v_2 \ \lambda_3 v_3 \ \lambda_4 v_4) \\
 &= (v_1 \ v_2 \ v_3 \ v_4) \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

$$\therefore AU = U \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4 \end{pmatrix}$$

$$\text{よって、} U^{-1}AU = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4 \end{pmatrix} \text{となり、対角行列となる。}$$

1

2 (2) (参考) 環境媒体別の残存比率の時系列変化 (汚染からの回復時間)

3 以下では、参考までに、VII.5.2.6 (1)で推計した時刻 t における媒体 i の $M_i(t)/M_i$ を用
 4 いて環境中での残留性を時系列的に視覚化した例を示す。これは環境中での残留性が特に
 5 高い物質に対し、今後の環境中での動態を予測するうえで有効な方法である¹。

6 全ての排出源から環境中への排出を止めた場合、環境中濃度は徐々に減少していく。し
 7 かし、排出停止から十分時間が経った時刻 t に対しても $M_i(t)/M_i$ が大きければ、汚染から
 8 の回復は遅く、その化学物質は環境中での残留性が高いと考えられる。以下では $M_i(t)/M_i$
 9 を「残存比率」と呼ぶ。

10 残存比率を用いて、例えば図表 VII.22 のような表し方により物質の残留性を視覚的に把
 11 握できる。これは、横軸は排出開始時からの時間を、縦軸は残存比率である。この例では、
 12 0～10 年は一定量で排出が行われ、10～20 年は排出ゼロという条件で推計したものである。
 13 最初の 10 年間は定常に到達するまでの様子を、後半の 10 年間は汚染からの回復の様子を
 14 表す。なお、10 年後の各媒体の化学物質量を初期条件として、式 VII-3 を改めて解くこと
 15 で、10～20 年の残存比率を推計できる。参考に計算式を次に示す。

¹ 下記の OECD の文書では「クリアランス時間」と呼ばれているものに相当する。

OECD (2004) Guidance Document on the Use of Multimedia Models for Estimating Overall Environmental Persistence and Long-Range Transport. OECD Series on Testing and Assessment No. 45.

1 $t = T$ 以降は排出量 $I = 0$ とする（前記の例であれば $T = 10$ 年）。

2 $t = T$ の時の化学物質量を $M|_{t=T}$ で表す。

3 VII.5.2.6 (1)②の式 VII-7 に $I = 0$ を代入すれば、

$$4 \quad M = \frac{cons. \times \exp(\lambda t)}{\lambda}$$

5 初期値条件を考えると、

$$6 \quad M|_{t=T} = \frac{cons. \times \exp(\lambda T)}{\lambda} \Rightarrow cons. = M|_{t=T} \times \lambda \times \exp(\lambda T)$$

$$7 \quad \therefore M = M|_{t=T} \times \exp(\lambda(t - T))$$

8 $t - T = t'$ （排出停止以降の経過時間）と置き換えれば、

$$9 \quad M = M|_{t=T} \times \exp(\lambda t')$$

10 したがって、各成分を並べると VII.5.2.6 (1)②の式 VII-8 に対応する式は

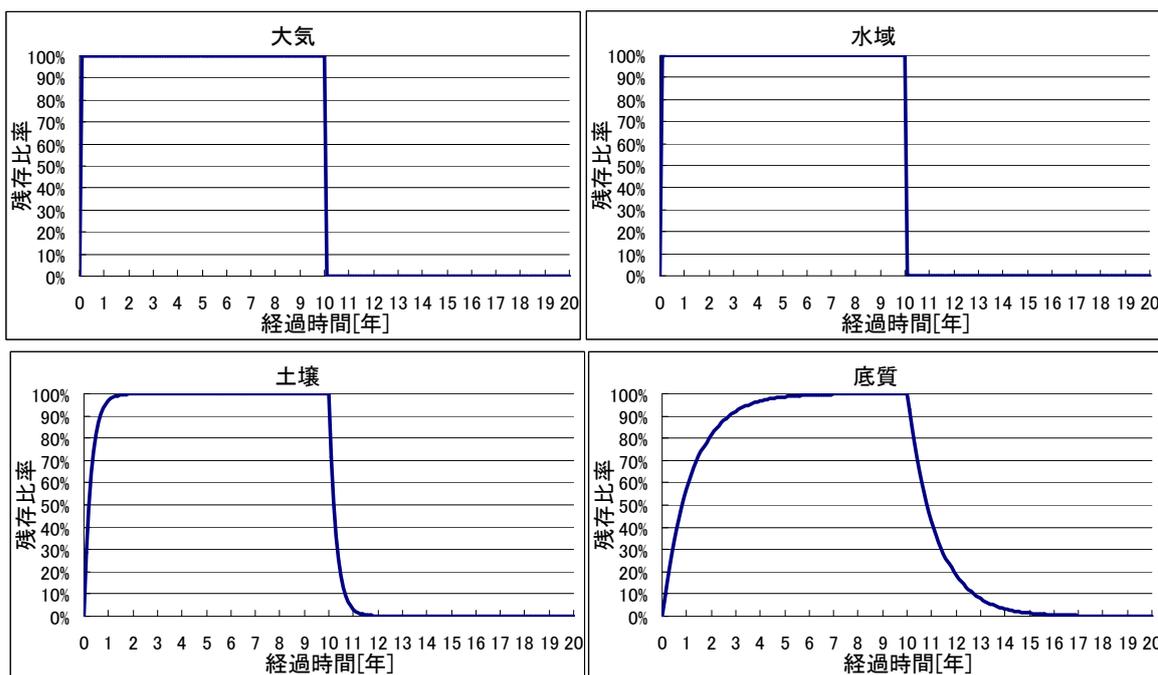
$$11 \quad M' = \begin{pmatrix} M_1|_{t=T} \times \exp(\lambda_1 t') \\ M_2|_{t=T} \times \exp(\lambda_2 t') \\ M_3|_{t=T} \times \exp(\lambda_3 t') \\ M_4|_{t=T} \times \exp(\lambda_4 t') \end{pmatrix}$$

12 VII.5.2.6 (1)②と同じく最後に M' を U で戻す必要がある。

13 $M = UM'$ これを計算すれば最終的に M が求められる。

14 図表 VII.22 は、残存比率の時系列変化を図示化した例である。

15
16 この例では排出が始まると大気と水域は短時間で定常状態に達するが、土壌と底質は定
17 常状態に達する（残存比率 99%）までに 1 年から数年程度の時間を要する。排出がなくな
18 ってからは大気と水域は速やかに媒体から消失するが、土壌と底質では、残存比率が 1 %
19 になるまでに、1 年から数年程度の時間を要する。このように定常状態到達時間と消失に要
20 する時間は裏表の関係がある。



図表 VII.22 各媒体の環境中残存比率の時系列変化の推定の例

VII.5.3 G-CIEMS モデルの解説

VII.5.3.1 モデルの入力項目

(1) 化学物質に関する入力データ

化学物質に関する入力データの一覧を図表 VII.23 に示す。PRTR 情報のメッシュデータについては、「地域における化学物質の環境リスク低減支援業務報告書」（環境省環境保健部環境安全課）のデータを用いる。なお、G-CIEMS では 25℃における入力を想定しているため、あらかじめ 25℃相当における値に換算した物性値等を入力するものとする。ヘンリー係数及び蒸気圧については、モデルに内蔵されている温度依存性を考慮した補正¹を行うようにパラメータを設定することとする。

図表 VII.23 化学物質に関する G-CIEMS への主要な入力データ及びデフォルト値

変数	説明	単位（基本的に SI 単位系）	入力値
Name	物質名称	—	物質個別
CasNo	CAS 番号（CAS 番号がない物質の場合は 99999 を入力する。）	—	物質個別

¹ G-CIEMS では、ヘンリー係数、蒸気圧、水溶解度、Kow、Koa を温度依存性がある変数として取扱い、モデル内部で地点の気温に応じた補正をすることが可能である。

MW	分子量	g/mol	物質個別
HenrysCnstnt	ヘンリー係数	Pa・m ³ /mol	物質個別
Slblty	対水溶解度	mol/m ³	物質個別
VaporPrssr	蒸気圧	Pa	物質個別
Koc	有機炭素補正土壌吸着係数	L/kg	物質個別
Kow	オクタノールと水との間の分配係数	—	物質個別
DgrdtnRate_Air_gas	大気中分解速度定数 (ガス)	s ⁻¹	物質個別
DgrdtnRate_Air_ptcl	大気中分解速度定数 (粒子)	s ⁻¹	物質個別
DgrdtnRate_Water_sol	水中分解速度定数 (溶液)	s ⁻¹	物質個別
DgrdtnRate_Water_SS	水中分解速度定数 (懸濁粒子)	s ⁻¹	物質個別
DgrdtnRate_Soil	土壌中分解速度定数	s ⁻¹	物質個別
DgrdtnRate_Sdmnt	底質中分解速度定数	s ⁻¹	物質個別
DgrdtnRate_Canopy	植生中分解速度定数	s ⁻¹	物質個別
Koa	オクタノール-大気分配係数	—	-1
Tboil	沸点	K	物質個別
Tmelt	融点	K	物質個別
deltaHenry	ヘンリー係数の温度変化のエンタルピー/気体定数	K	40000/8.314
deltaEair	大気分解速度活性化エネルギー/気体定数	K	-1
deltaEriver	水中分解速度活性化エネルギー/気体定数	K	-1
deltaEsoil	土壌中分解速度活性化エネルギー/気体定数	K	-1
deltaEsed	底質中分解速度活性化エネルギー/気体定数	K	-1
deltaKow	Kow の水相からオクタノール相への相変化エンタルピー/気体定数	K	-1
deltaVaporPrssr	蒸気圧の温度変化のエンタルピー/ガス定数	K	50000/8.314

1

2

3 図表 VII.23 中の入力値の欄において、「物質個別」、「物質個別又は-1」又は「-1」の
4 主として3種類の入力値を入力することとしている。これらについて以下で説明する。

5 ・「物質個別」の場合の入力値

6 「物質個別」と記載している変数については、評価対象化学物質の物性値を入力
7 することが必須である。入力する物理化学的性状等に関する変数（分子量、ヘ
8 ンリー係数、対水溶解度、蒸気圧、有機炭素補正土壌吸着係数 オクタノールと
9 水との間の分配係数、融点、沸点、各種速度定数。）の値には、物理化学的性状の
10 信頼性基準で定められている方法に基づき選定したキースタディを用いるものと
11 する。

12 DgrdtnRate_Air_gas、DgrdtnRate_Air_ptcl、DgrdtnRate_Canopy には大気
13 中分解速度定数、DgrdtnRate_Water_sol、DgrdtnRate_Water_SS には水域中分
14 解速度定数、DgrdtnRate_Soil、DgrdtnRate_Soil0、DgrdtnRate_Soil1、
15 DgrdtnRate_Soil2、DgrdtnRate_Soil3、DgrdtnRate_Soil4、DgrdtnRate_Soil5、
16 DgrdtnRate_Soil6 には土壌中分解速度定数、DgrdtnRate_Sdmnt には底質中分解
17 速度定数を入力することとする。

18 なお、DgrdtnRate_SeaWater_sol、DgrdtnRate_SeaWater_SS、
19 DgrdtnRate_SeaSdmnt は海域中での分解速度定数に関するものであり、本評価
20 では未使用の項目であるが、これらの速度定数には河川のものと同じ値を設定す
21 る。

1 ・「-1」の場合の入力値

2 「-1」と記載している変数は、-1を固定値として設定することで、モデル
3 中で「他の物性値から計算する」又は「モデル中の各地点の気温に応じた温度依
4 存性を考慮しない」という設定とするために入力する。

5 具体的には、オクタノール/大気分配係数 K_{oa} については他の物性値からの計
6 算値を用いるために「-1」を設定する。また、本評価では、分解速度定数や K_{ow}
7 に対してモデルに内蔵されている温度依存性を考慮した補正を用いないため、各
8 地点の気温に応じた温度依存性を考慮ための項目である ΔK_{oa} 、 ΔE_{air} 、
9 ΔE_{river} 、 ΔE_{soil} 、 ΔE_{sed} 、 ΔE_{sea} 、 ΔE_{seas} 、 ΔK_{ow} 及び
10 沸点には、「-1」を入力することで補正を行わないようにする。

11 ・ヘンリー係数と蒸気圧の温度変化に対する係数（エンタルピー/気体定数）の入力値

12 化審法リスク評価ガイダンス I. 評価の準備における、下記の蒸気圧の温度変
13 化に対する補正式と、水溶解度の温度変化に対する補正式を考慮して、
14 $\Delta H_{Henry}=40000/8.314$ 、を $\Delta H_{VaporPrssr}=50000/8.314$ を用いることとする。

15 <蒸気圧の温度変化に対する補正式>

$$VP_{target} = VP_{temp} \exp\left(\frac{\Delta H_{vap}}{R} \times \left(\frac{1}{T_{temp}} - \frac{1}{T_{target}}\right)\right)$$

17 ただし、 $\Delta H_{vap}=50000\text{J/mol}$ 、気体定数 R は $8.314\text{ J/K}\cdot\text{mol}$ 、 T_{temp} は補正前の蒸気
18 圧 VP_{temp} における温度、 T_{target} は補正後の蒸気圧 VP_{target} における温度を表す。

19 <水溶解度の温度変化に対する補正式>

$$WS_{target} = WS_{temp} \exp\left(\frac{\Delta H_{sup}}{R} \times \left(\frac{1}{T_{temp}} - \frac{1}{T_{target}}\right)\right)$$

21 ただし、 $\Delta H_{sup}=10000\text{J/mol}$ 、気体定数 R は $8.314\text{ J/K}\cdot\text{mol}$ 、 T_{temp} は補正前の水溶
22 解度 WS_{temp} における温度、 T_{target} は補正後の水溶解度 WS_{target} における温度を表す。

23
24
25 ヘンリー係数 H は、 $H=VP/WS$ として推定可能であることと、上記 2 つの式
26 を考慮し、

$$H_{target} = H_{temp} \exp\left(\frac{\Delta H_{vap} - \Delta H_{sup}}{R} \times \left(\frac{1}{T_{temp}} - \frac{1}{T_{target}}\right)\right)$$

27 で補正することができると考えられる。

28 以上より、

$$\text{deltaHenry} = \frac{\Delta H_{\text{vap}} - \Delta H_{\text{sup}}}{R} = \frac{(50000 - 10000)}{8.314}$$

$$\text{deltaVaporPrssr} = \frac{\Delta H_{\text{vap}}}{R} = \frac{50000}{8.314}$$

1

2

を用いる。

3

4 VII.5.3.2 モデルの出力項目

5

モデルの出力項目では、各媒体中の濃度やその内訳、フラックス等の情報が得られる。

6

それらのうち、暴露量の評価に主に使用する河川、大気に関する情報部分について、

7

図表 VII.24 に示す。また、直接暴露量の評価の際に用いることはないが、別途暴露量評価

8

モデルで算出する魚類中濃度等と G-CIEMS 内での濃度とを比較する際に参照する項目に

9

ついて図表 VII.25 に示す。

10

11 図表 VII.24 モデルの出力項目のうち暴露量評価に使用する可能性のある項目

評価に用いる主要項目	テーブル※	フィールド名	単位
河川水質バルク濃度	River_～	Cw	kg/m ³
河川底質濃度	River_～	Cse	kg/kg
河川水質懸濁態粒子濃度	River_～	Css	kg/kg
河川水質溶存態濃度	River_～	Cw_sol	kg/m ³
大気中濃度	Air_～	Cair	kg/m ³

12

※テーブル名は計算対象物質名称や計算条件等により異なるため、ここではテーブル名の

13

先頭部分のみを示す。

14

15 図表 VII.25 モデルの出力項目のうち暴露量評価で参考とする可能性のある項目

参考とする可能性のある項目	テーブル※	フィールド名	単位
河川魚類中濃度	River_～	Cfish	kg/kg
エアロゾル中濃度	Air_～	Caerosol	kg/m ³
土壌中濃度	Soil_～	Csoil	kg/kg

16

※テーブル名は計算対象物質名称や計算条件等により異なるため、ここではテーブル名の

17

先頭部分のみを示す。

1 VII.5.3.3 モデルの適用範囲

2 (1) 対象とする物質

3 評価対象とする物質は基本的に有機化学物質とする。

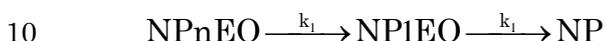
4

5 (2) モデルの検証事例

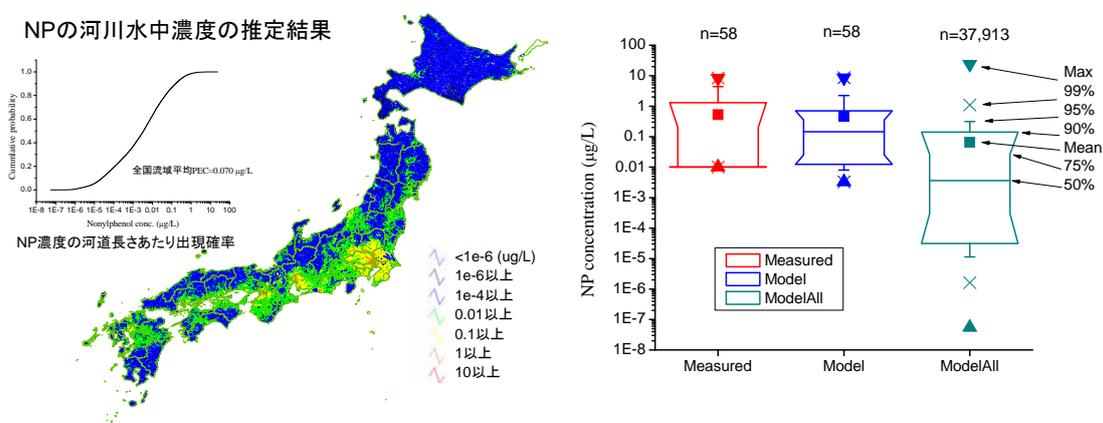
6 ① ノニルフェノールの河川水中濃度の推定

7 ノニルフェノール (NP) について、PRTR による排出量推定データを用いた G-CIEMS
8 による動態モデル計算を行い、河川水中濃度を推定した¹。

9 なお、ノニルフェノールの河川水中濃度の推定を行うにあたって、



11 ということ、ノニルフェノールエトキシレート(NPnEO、NP1EO)からの化学種の変換を
12 考慮することとし、PRTR による排出量推定データとして、ノニルフェノールエトキシレ
13 ートの排出量も合わせて利用して推定を行い、観測値の分布とモデル計算の結果は概ね近
14 いところにあるとされている²。なお箱ひげ図は左から観測値の分布、中央は全国流域のう
15 ち観測値の存在する流域のモデル推定値の分布、右は全国全流域のモデル推定値の分布を
16 示す。



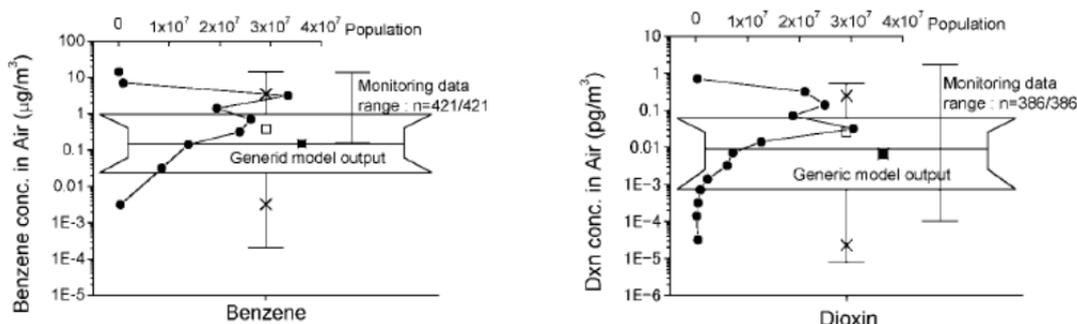
17
18 図表 VII.26 ノニルフェノールの河川水中濃度の推定値と実測値の比較³

19
1 鈴木規之、化学物質の環境動態とリスク評価、日本薬学会 薬学雑誌 **127** (3) 437-447 (2007)
2 鈴木規之、李文淳、桜井健郎、森口祐一、田邊潔、白石寛明、森田昌敏：GIS 多媒体モデルによる空間平均 PEC (予測環境濃度) を用いた人および生態暴露評価手法、第 14 回環境化学討論会講演要旨集、172-173 (2005)
3 鈴木規之、李文淳、桜井健郎、森口祐一、田邊潔、白石寛明、森田昌敏：GIS 多媒体モデルによる空間平均 PEC (予測環境濃度) を用いた人および生態暴露評価手法、第 14 回環境化学討論会講演要旨集、172-173 (2005)

② ベンゼン及びダイオキシンの大気中濃度に関する Generic 多媒体モデルとの比較

環境中濃度に関する G-CIEMS の推定値と、これまで多媒体モデルとして広く用いられているボックスモデルのような Generic 多媒体モデルとの比較により、環境中濃度の統計的分布とヒトへの暴露状況の関連の考察を行った。

図表 VII.27 に、ベンゼンとダイオキシン類の G-CIEMS による全国の推定濃度分布と、これまで広く用いられている Generic 多媒体モデル（ここでは EUSES/SimpleBox）の点推定値、モニタリングデータの範囲及び GIS モデルの推定濃度域に居住する人口の分布を重ねた結果を示す。その結果、従来の Generic 多媒体モデルが、詳細な分解能を持つ動態モデルの推定分布の中でおよそ中央値を与えること、動態モデルにより推定した空間濃度の分布はほぼ対数正規的であり、また、人口は当該物質の濃度分布の 95 パーセンタイル程度以上の高濃度域に大部分が居住していること等が示された。



図表 VII.27 G-CIEMS の大気中濃度推定値分布、モデル推定濃度域に居住する人口分布及び Generic 多媒体環境運命モデル(EUSES/Simple Box)での大気中濃度の点推定値の比較¹

さらに、ベンゼン、1,3-ブタジエン及びダイオキシンについて、G-CIEMS、Generic 多媒体モデル及び観測値の結果を用い、環境中濃度と人口分布の関連を考慮して求めた暴露加重平均濃度(EWAC)を比較した結果を図表 VII.28 に示す。ただし、大気中の EWAC は

$$EWAC_{\text{Generic}} = \text{広域大気コンパートメントの大気中濃度}$$

$$EWAC_{\text{G-CIEMS}} = \frac{\sum \{ (\text{各グリッドの大気中濃度}) \times (\text{グリッド内の人口}) \}}{\text{総人口}}$$

$$EWAC_{\text{モニタリング}} = \frac{\sum \{ (\text{人口密度分類別の平均大気中濃度}) \times (\text{人口密度分類での人口}) \}}{\text{総人口}}$$

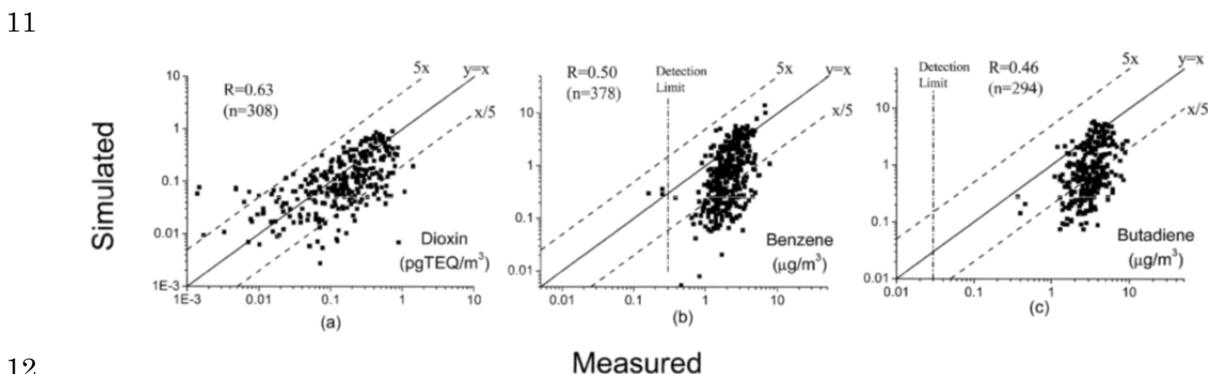
として計算したものである。

¹ Noriyuki Suzuki *et. al.*, Geo-referenced multimedia environmental fate model(G-CIEMS): Model formulation and comparison to the generic model and monitoring approaches, *Environ. Sci. Technol.* **2004**, 38, 5682-5693

1
2 また、各物質の大気中濃度に関するモニタリングデータと G-CIEMS 推定値の比較を図
3 表 VII.29 に示す。図中の斜めの実線及び点線は、G-CIEMS 推定濃度とモニタリング濃度
4 とが同じ濃度、5 倍、1/5 倍の濃度を表している。ダイオキシン類については、推定濃度の
5 大部分がモニタリング濃度のファクター5 (1/5～5 倍)に含まれている。ベンゼンと 1,3-ブタ
6 ジエンについては、わずかに推定濃度がモニタリング濃度を下回るものが見られた。しか
7 かし、推定濃度/モニタリング濃度の比を見た場合には、いずれの物質もファクター2～5 に
8 おさまっている。

9
10 図表 VII.28 G-CIEMS、Generic 多媒体モデル及び観測地の暴露加重平均濃度の比較

	Generic 多媒体モデル	G-CIEMS	モニタリング
ベンゼンの大気中の EWAC [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.15	1.4	2.3
ダイオキシン類の大気中の EWAC [pgTEQ/m^3]	0.0067	0.20	0.23
1,3-ブタジエンの大気中の EWAC [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	0.0071	0.14	0.32



13 図表 VII.29 大気中濃度のモニタリングデータと推定値の比較：(a)ダイオキシン類 (b)ベンゼン
14 (c)1,3-ブタジエン (ダイオキシン類については TEQ 換算のため明確な検出下限がなく、図
15 中で示していない。)¹

16
17

¹ Noriyuki Suzuki *et. al.*, Geo-referenced multimedia environmental fate model(G-CIEMS): Model formulation and comparison to the generic model and monitoring approaches, *Environ. Sci. Technol.* **2004**, 38, 5682-5693

1 図表 VII.30 にダイオキシン類のモニタリングデータと G-CIEMS 推定値間での大気、河
2 川水質、底質及び土壌中平均濃度の比較結果を、図表 VII.31 に河川水質、底質及び土壌中
3 濃度のモニタリングデータと G-CIEMS 推定値の比較結果を示す（大気については、前述
4 の図表 VII.29 において、既に示している。）。

5 河川、底質および土壌については、モデル推定の技術的困難がより大きいため大気と比
6 較してやや一致度が低くなったが、全体としてはファクター10 程度に入る地点が多かった
7 と考えられる。

8 図表 VII.30 に示した媒体別の平均濃度の比較においては、G-CIEMS の推定濃度がすべ
9 での媒体においてモニタリング濃度とファクター2 以内の一致をしている。Generic 多媒体
10 モデルについては、大気を除けばファクター10 以内の一致をしている。

11 図表 VII.32 にベンゼン、ダイオキシン類、1,3-ブタジエン及びフタル酸ビス（2-エチ
12 ルヘキシル）についての G-CIEMS の推定濃度の分布とモニタリング濃度との比較を示す。
13 図中には、モニタリングデータの範囲と検出地点数/地点数についても示した。この結果
14 から、1,3-ブタジエンの底質の結果を除く各データにおいて、Generic 多媒体モデルでの濃
15 度は G-CIEMS の 50%ile に近い濃度となり、両モデルで同程度の結果を得ることができる
16 ことが分かる。

17 図表 VII.33 に河道長を考慮した河川水質中のダイオキシン濃度推定値とモニタリング
18 濃度の累積分布の比較を示す。この結果から、推定濃度の累積分布とモニタリング濃度の
19 累積分布とが全体的に一致することがわかり、G-CIEMS の推定濃度の結果を地理的特性も
20 考慮して評価に用いることのできる可能性を示している。

21

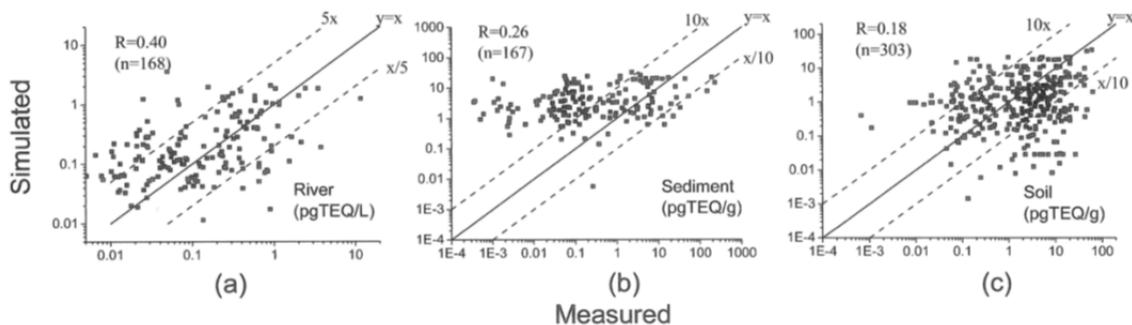
22 図表 VII.30 G-CIEMS、Generic 多媒体モデル及び観測地の媒体別平均濃度の比較¹

	Generic 多媒体モデル	G-CIEMS	モニタリング
大気 [pg/m ³]	0.0067	0.16	0.22
河川水質 [pg/L]	0.15	0.35	0.39
土壌 [pg/g]	4.4	6.4	6.4
底質 [pg/g]	0.97	4.8	6.1

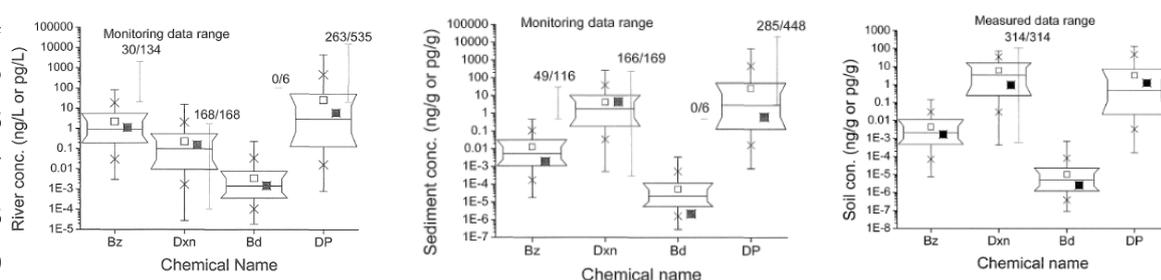
23

24

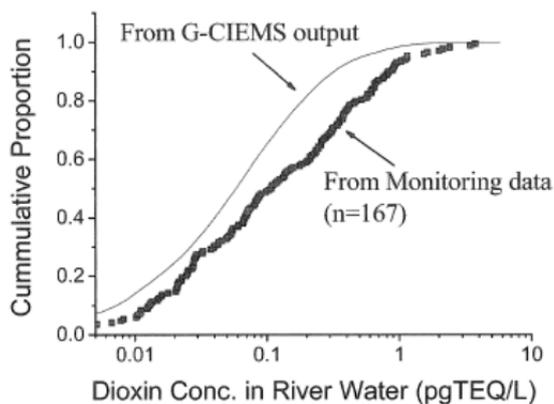
¹ Noriyuki Suzuki *et. al.*, Geo-referenced multimedia environmental fate model(G-CIEMS): Model formulation and comparison to the generic model and monitoring approaches, *Environ. Sci. Technol.* 2004, 38, 5682-5693



図表 VII.31 ダイオキシン類の河川水質、底質及び土壌中濃度のモニタリングデータと推定値の比較：(a)河川水質 (b)底質 (c)土壌¹



図表 VII.32 G-CIEMS と generic 多媒体モデル及びモニタリングデータの河川水質濃度、底質中濃度及び土壌中濃度の範囲の比較
(Bz:ベンゼン、Dxn : ダイオキシン類、Bd : 1,3-ブタジエン、DP : フタル酸ビス (2-エチルヘキシル))
箱ひげ図の端点、横線、×点、箱は G-CIEMS の推定濃度の統計値を表し、それぞれ 1、10、25、50、75、90、99 パーセンタイルと最小値、最大値を表している。黒四角 (■) は generic 多媒体モデルの結果を示す。) ²



図表 VII.33 河道長を考慮した河川水質中のダイオキシン濃度推定値とモニタリング濃度の累積分布の比較³

¹ 同上

² 同上

³ Noriyuki Suzuki *et. al.*, Geo-referenced multimedia environmental fate

1

2 VII.5.4 環境中濃度等の空間的分布の推計における人の摂取量

3 ここでは、本編VII.3の環境中濃度等の空間的分布の推計における人の摂取量について、
4 特にV章と推計手法が異なる農作物や畜産物について説明する。

5

6 VII.5.4.1 食品摂取量等の情報

7 環境中濃度等の空間的分布の推計における人の摂取量で使用する食品摂取量等の情報を
8 図表 VII.34 に示す。これらの値の設定の経緯等についてはV章の食品摂取量等の設定の経
9 緯に関する記載を参照のこと。

10

11 図表 VII.34 環境中濃度等の空間的分布の推計で用いる食品摂取量等の情報

説明	単位	値	(うち排出源周辺)	出典・参照先
人の体重	[kg]	50	-	V.7.5.5 (2)①
人の吸入摂取量 (大気)	[m ³ /day]	20	-	V.7.5.5 (2)②
人の地下部農作物の摂取量	[g/day]	163.7	(7.0)	V.7.5.5 (2)③
人の地上部農作物(Protected)の摂取量	[g/day]	240.8	(19.7)	V.7.5.5 (2)③
人の地上部農作物(Exposed)の摂取量	[g/day]	204.7	(16.8)	V.7.5.5 (2)③
人の乳製品の摂取量	[g/day]	72.4	(0.6)	V.7.5.5 (2)④
人の牛肉の摂取量	[g/day]	9.4	(0.2)	V.7.5.5 (2)④
人の魚介類の摂取量	[g/day]	45.3	-	V.7.5.5 (2)⑤
人の飲水量	[L/day]	2	-	V.7.5.5 (2)⑥

12

13 VII.5.4.2 農作物からの摂取量

14 農作物 (地上部農作物 (Exposed、Protected)、地下部農作物) からの摂取量については
15 当該流域の農作物からの摂取量については、当該流域の環境中濃度から当該流域の農作物
16 中濃度を推計し、図表 VII.34 の排出源周辺の農作物摂取量を乗じることにより算出する。
17 また当該流域以外の農作物からの摂取量については、当該流域以外の環境中濃度 (流域面
18 積による重み付けを考慮した平均値) から当該流域以外の農作物中濃度を推計し、図表
19 VII.34 のそれぞれの摂取量から排出源周辺の農作物摂取量を減じたもの乗じることにより
20 算出する。当該流域における農作物からの摂取量としては、当該流域の農作物からの摂取
21 量と当該流域以外の農作物からの摂取量を合計して算出する。なお、環境中濃度から各農
22 作物中濃度を推計する方法についてはV章と同様である。

23

1 VII.5.4.3 畜産物からの摂取量

2 畜産物（牛肉、乳製品）からの摂取量については当該流域の農作物からの摂取量につい
3 ては、当該流域の環境中濃度から当該流域の畜産物中濃度を推計し、図表 VII.34 の排出源
4 周辺の畜産物摂取量を乗じることにより算出する。また当該流域以外の畜産物からの摂取
5 量については、当該流域以外の環境中濃度（流域面積による重み付けを考慮した平均値）
6 から当該流域以外の畜産物中濃度を推計し、図表 VII.34 のそれぞれの摂取量から排出源周
7 辺の畜産物摂取量を減じたもの乗じることにより算出する。当該流域における畜産物から
8 の摂取量としては、当該流域の畜産物からの摂取量と当該流域以外の畜産物からの摂取量
9 を合計して算出する。なお、環境中濃度から各畜産物中濃度を推計する方法についてはV
10 章と同様である。

11

12 VII.5.4.4 農作物及び畜産物以外からの摂取量

13 農作物（地上部農作物（Exposed、Protected）、地下部農作物）及び畜産物（牛肉、乳製
14 品）以外からの摂取量についてはV章と同様である。