

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（NITE 案）

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 3 月

独立行政法人 製品評価技術基盤機構

はじめに

本技術ガイダンス（NITE 案）は、化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律（以下、「化審法」という。）における優先評価化学物質の標準的なリスク評価の手法に関し、独立行政法人製品評価技術基盤機構（NITE）が化審法を所管する厚生労働省、経済産業省、環境省（以下、「3 省」という。）に提案している文書である。

化審法では、リスクが十分に低いとは判断できない物質を、3 省が優先評価化学物質に指定し、そのリスク評価を行う。このリスク評価の手法は、平成 23 年度に 3 省の合同審議会において審議され、意見募集を経て公開された。この手法に関する資料の 1 つである「化審法に基づく優先評価化学物質のリスク評価の基本的な考え方」では、「科学的根拠や国際的動向を踏まえて構築し、透明性を担保するために技術ガイダンスとして公開することとする。」と記載されている。

NITE は、経済産業省からの「独立行政法人製品評価技術基盤機構に対する第三期中期目標」に対し、それを達成するための第三期中期計画及び年度計画の中で、化審法のリスク評価手法に関する技術ガイダンスの作成を支援することになっている。そのため、独自に技術ガイダンス案を順次作成（ただし、手法の中には NITE が技術ガイダンス案を作成しない部分も含まれる）し、3 省に提案している。これは過去に以下の経済産業省の委託調査を NITE が受託し、リスク評価手法を検討してきた経験がベースになっている。

- ・ 平成 18 年度環境対応技術開発等（化学物質の有害性評価・リスク評価のための基盤情報の整備及び評価スキームの確立）
- ・ 平成 19 年度環境対応技術開発等（化審法における監視化学物質のリスク評価スキームに関する調査）
- ・ 平成 20 年度環境対応技術開発等（化審法における監視化学物質のリスク評価スキームに関する調査）
- ・ 平成 21 年度環境対応技術開発等（改正化審法における化学物質のリスク評価スキームに関する調査）

なお、本技術ガイダンス（NITE 案）は、上記のような状況で作成しており、まだ未作成部分があるほか、更なる検討等により変更される可能性がある。また、今後の 3 省における運用上の扱いに関する検討や技術的な知見の蓄積等により、順次、修正が行われる予定である。

平成 26 年 3 月

独立行政法人 製品評価技術基盤機構

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～（NITE 案）
Ver.1.0 平成 26 年 3 月

改訂履歴

Version	日付	改訂内容
Ver .1.0	平成 26 年 3 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.4 残留性の評価.....	13
VII.4.1 目的等.....	13
VII.4.2 多媒体モデルの利用.....	13
VII.5 付属資料.....	17
VII.5.1 はじめに.....	17
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.....	17

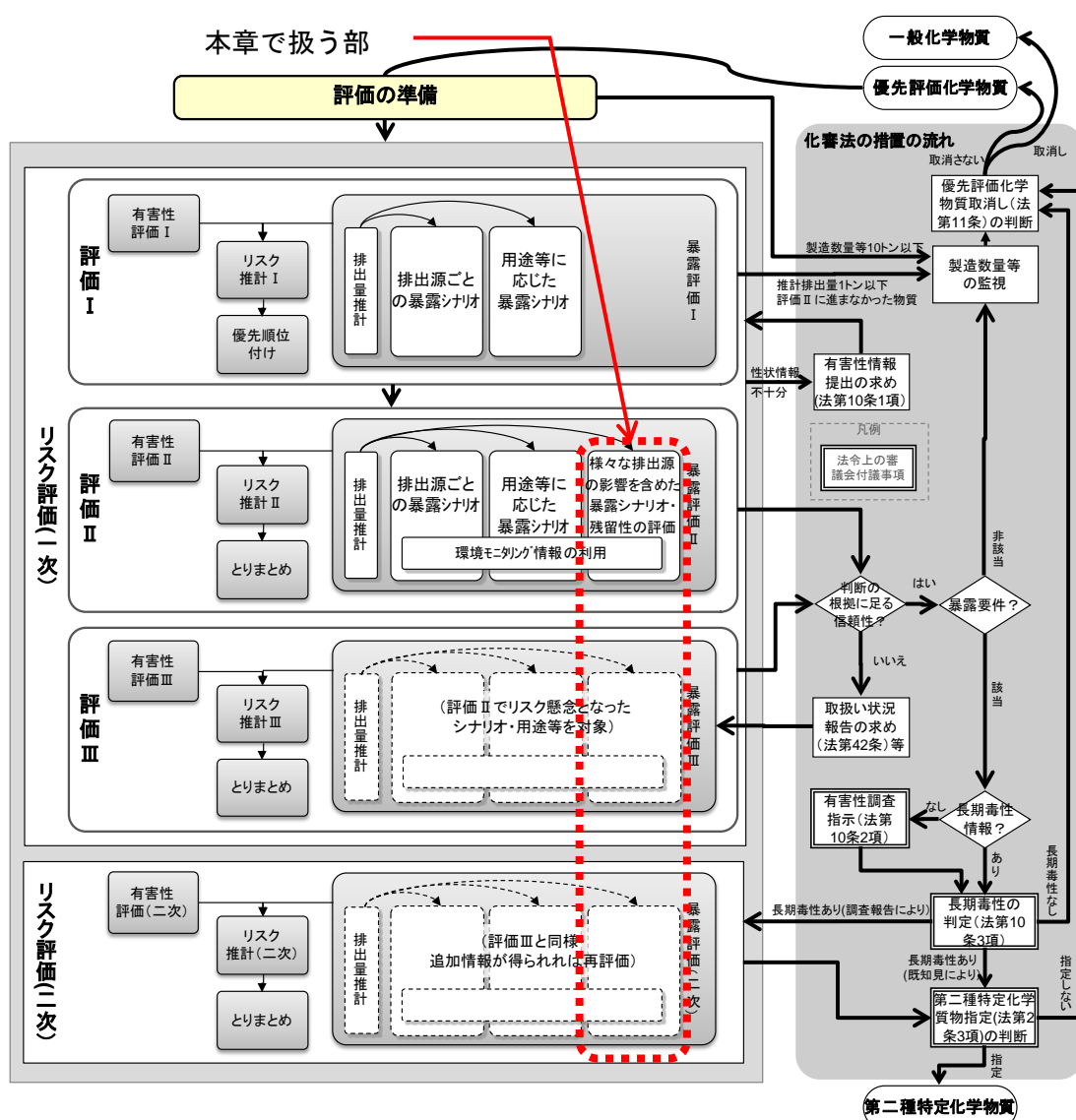
VII. 暴露評価

～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。リスク評価スキーム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 リスク評価スキーム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。

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。

(ア) 広域的・長期的スケールの暴露状況の推計

(用いる情報：製造数量等の届出情報、PRTR 情報)

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（定常状態を想定）な暴露状況の推計を行う。製造数量の届出情報を用いて推計する場合は、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。

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。

(イ) 環境中濃度等の空間的分布の推計

(用いる情報：PRTR 情報)

PRTR 情報が得られる場合には、面的な排出源（家庭、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）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限り解析するため、明らかに化審法の規制対象の範囲外となる PRTR 情報については除外したケースについても推計を行う。

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。

(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、環境中の定常状態到達時間等を推計する。

(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状況について整理する。

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

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、移動体の移動体の排ガス（燃焼生成分）、
29 家庭、非対象業種等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」
30 では、化審法の製造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
31 含まれていれば評価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。
32 すなわち、「排出源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

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
度等として利用する。第Ⅷ章を参照のこと。

1 い排出源からの排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
2 源ごとの暴露シナ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。
3 これが、広域的・長期的スケールの暴露状況の推計によって補足する役割である。そのた
4 め、広域的・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
5 ることもある）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する。

6
7 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
8 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）を対象と
9 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。
10 また、製造数量の届出情報を用いて推計する場合は、製造段階、調合段階、工業的使用段
11 階、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
12 ー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
13 届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
14 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。

15 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
16 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
17 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
18 の動態を推計する。

19 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
20 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
21 説明する。

- 22
- 23 ・ 環境媒体間の分配比率（広域・定常状態における）
- 24 ・ 人の摂取量の摂取媒体別比率（広域・定常状態における）
- 25

26 VII.2.1.2 推計項目

27 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
28 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
29 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
30 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
31 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
32 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

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。

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。環境媒体別の存在量から環境媒体別濃度を推計し、そこから食
17 物 (魚介類、農作物、畜産物) 中の濃度を推計する (環境中濃度から食物中濃度を推計す
18 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)。それらの一定量を摂取
19 すると仮定し、全経路からの摂取量 (大気吸入、飲料水摂取、魚介類摂取、地上部農作物
20 摂取、地下部農作物摂取、牛肉摂取、乳製品摂取の 7 経路) を摂取媒体別比率にしたもの
21 である。これは特定の排出源の影響下ではない広域的・長期的な人の暴露状況を表してい
22 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判明したとする¹。このよ
28 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」の結果
29 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) の魚介類の濃度レ
30 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路
32 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、排出源ごとの

OECD (last update 2012) Manual for assessment of chemicals. Chapter 2. Data 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 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れ
2 る。

3
4 (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
5 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
6 場合と、それに加えて、化審法情報を用いる場合であれば家庭用・業務用での使用段階や
7 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比較を行い、
8 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 排出量を用いる場合
9 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X章で説明する。

18

19 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

20 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
21 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
22 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
23 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

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 に記載している。

2

3 VII.2.2.1 多媒体モデルの種類等

4 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
 5 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、化学物質の環境中での
 6 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
 7 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
 8 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
 9 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
 10 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。

11 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
 12 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
 13 ／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
 14 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
 15 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
 16 ている。

17

18

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

19

20 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、各国が
 21 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ル
 22 群（CHEMCAN、CHEMFRAN、MNSEM等。MNSEMはVII.2.2.3 で後述するように本
 23 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に相
 24 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に含まれる多媒体モ

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 デルSimple BoxもレベルIIIである。

2

3 VII.2.2.2 排出源ごとの暴露シナリオとの比較

4 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・
 5 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
 6 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
 7 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。

8 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
 9 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。

10

11 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
 12 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
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 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.

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SIDS
6 のステージにおいて各国が初期レベルの環境経路暴露を評価するのに適用できるモデルと
7 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安全対
8 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ル
17 トで設定されている（詳細は付属資料 VII.5.2.1 (1)参照）。

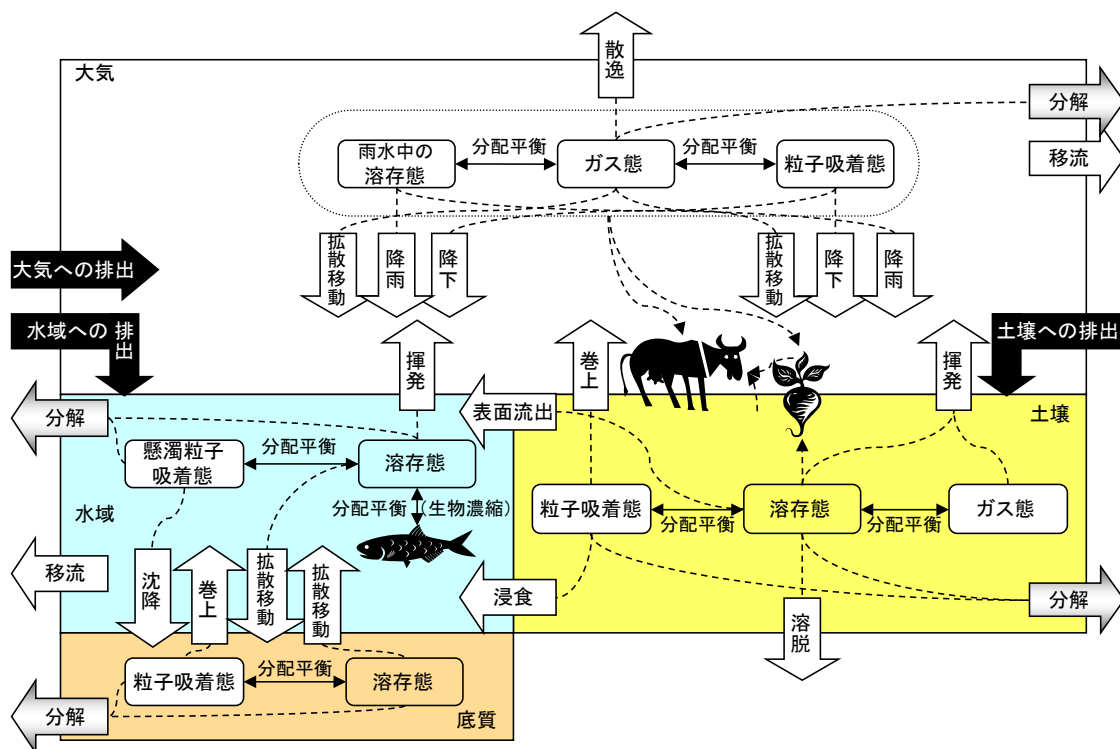
18 MNSEM の全体構成を図表 VII-4 に示す。

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 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]
4

5 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
6 ことになり、化学物質質量 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
7 体中の化学物質質量 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
8 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
9 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。

10

11 VII.2.2.5 数理モデルの適用

12 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
13 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同IV.4.6
14 で集計した媒体別排出量を入力する。

15 $A_{i,j}$ 、 $I_{j,i}$ 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
16 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
17 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
18 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)
19 ③を参照されたい。

20

- 21 ・ 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
22 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
23 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
24 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。
- 25 ・ 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
26 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
27 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。

28

1

2 VII.3 環境中濃度等の空間的分布の推計

3 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、PRTR 情報が得られる場合
4 に適用する、地理情報を活用した数理モデルを用いた環境中濃度等の全国的な空間分布の
5 推計方法を説明する。

6

（記載を追加予定）

7

1

2 VII.4 残留性の評価

3 VII.4.1 目的等

4 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、
5 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
6 を評価することを目的とする。

7 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:
8 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
9 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
10 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
11 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
12 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
13 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
14 するうえ等で役立つものと考えられる。

15 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
16 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。

17 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。

18

19 VII.4.2 多媒体モデルの利用

20 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
21 (PBT 物質: Persistent, Bio-accumulative and Toxic 物質) の環境中残留性と長距離移動
22 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
23 図表 VII-5 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
24 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
25 く、MNSEM3β NITE 版 (図表 VII-5 ではサイト特異的レベルⅢに該当する) を用いて残
26 留性を評価する。

27

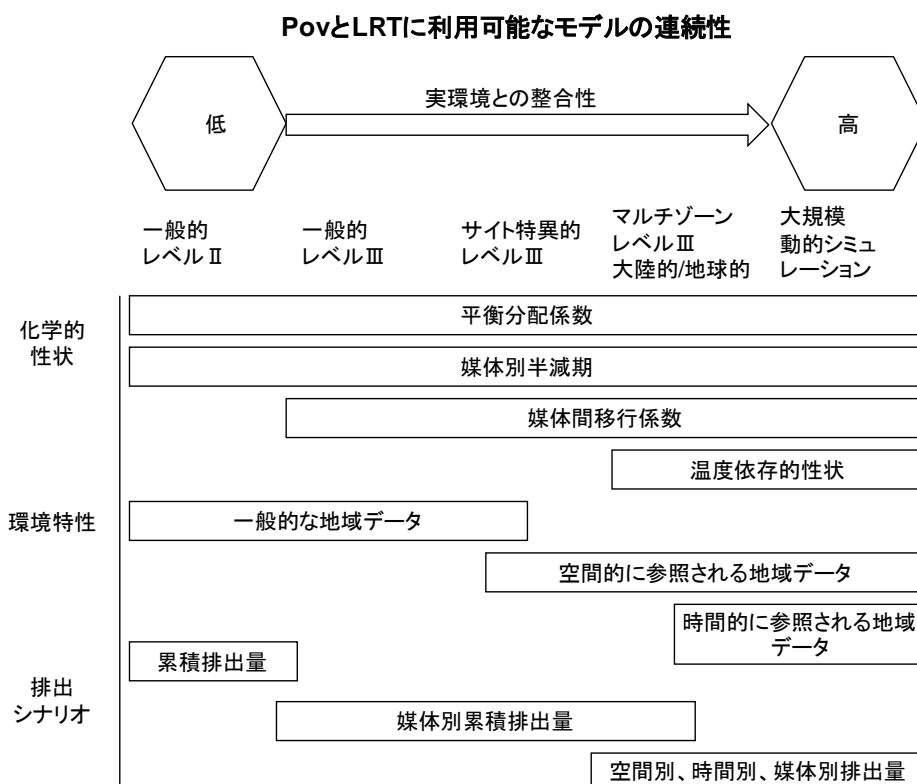


図3-1.PovとLRTの推計に利用可能な多媒体環境運命モデルの連続性の説明

図表 VII-5 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、MNSEM3β 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て

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 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 ャ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の値が大きいほど環境
3 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 12 (2) 定常状態到達時間

13 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
14 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
15 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。
16 これが短いということは、対象物質の評価対象年度の排出速度ではすぐに定常濃度に達し
17 それ以上の濃度にはならないこと、逆に言うと排出がなくなれば速やかにその媒体からは
18 その化学物質が消失することを意味する。これが長いことは (例えば数年～数十年等)、評
19 価年の排出量では定常状態に達するまでに長い時間がかかり、たとえ現状の環境中濃度が
20 低く、今後排出量が増えず、現状の排出量でも環境中濃度は上昇していく可能性があるこ
21 と等を意味する。また、この定常状態到達時間は、環境への排出が停止した後、残留して
22 いる化学物質が消失、すなわち汚染が回復するのに要する時間ともいえる。

23 定常状態到達時間は、概算による予測値ではあるものの、広域的・長期的観点から、現
24 状の環境中濃度の位置づけと将来のトレンドを概観するものとして、推計項目としている。

25 26 VII.4.2.2 数理モデルの適用

27 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量
28 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 で右
29 辺=0 と仮定し、各媒体での定常状態の化学物質量 M_i を求め、 A_{ij} 、 I_{ji} 及び k_i から各媒体
30 での化学物質の減少速度を求める。

31
32
33

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
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。

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

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。

- 1
- 2 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
- 3 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。
- 4

1

2 VII.5 付属資料

3 VII.5.1 はじめに

4 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
5 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
6 収載する。

7 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
8 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。

9 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
10 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
11 いる点に留意されたい。

12

13 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 14 数理モデル

15 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
16 性の推計に用いる数理モデルMNSEM3 β NITE版¹を説明する。

17

18 VII.5.2.1 数理モデルの概要

19 (1) モデル推計に用いる情報

20 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。

21

22 ① 化学物質の情報

23 MNSEM3 β NITE 版で使用する化学物質の情報を図表 VII-6 に示す。

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-6 MNSEM3β 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 MNSEM3β NITE 版で使用する環境条件の情報を図表 VII-7 に示す。

6

7 図表 VII-7 MNSEM3β 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-8 に示す。これらの値の
 8 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-8 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 ①環境条件及び食品摂取量等

2 前述したように環境条件と食品摂取量等は図表 VII-7 と図表 VII-8 の値を用いる。

4 ②農作物中濃度の推計

5 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
6 (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
7 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
8 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
9 じく 60 日に制限していることになる。

10 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、
11 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。

13 ③分解速度定数

14 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
15 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
16 参照。

18 ④牛肉及び乳製品の生物移動係数

19 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
20 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「 $3 < \log Pow$
21 < 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
22 は上限値または下限値に置き換えた。

24 ⑤飲料水中濃度の推計

25 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
26 濃度とした (「V.7.3.5 (1) 河川水中濃度 (人の健康評価)))。

28 ⑥魚介類中濃度の推計

29 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
30 慮して推計することとした。

32 ⑦土壌の非意図的摂取

33 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。

35 VII.5.2.2 推計方法

36 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

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	—		

2

3 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-9 の示すとおりである。なお、
 4 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。係数
 5 $A(1,1) \sim A(4,4)$ の具体的な数式は MNSEM UM を参照されたい。

6

7

図表 VII-9 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 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

係数	内容
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
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29

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で求められる。したがって、大気・水域・土壌それぞれの排出量が決めれば、 $MSA : MSW : MSSO : MSSE$ の比、即ち媒体間の分配比率を求められる。

$0 = I + AM$ 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。

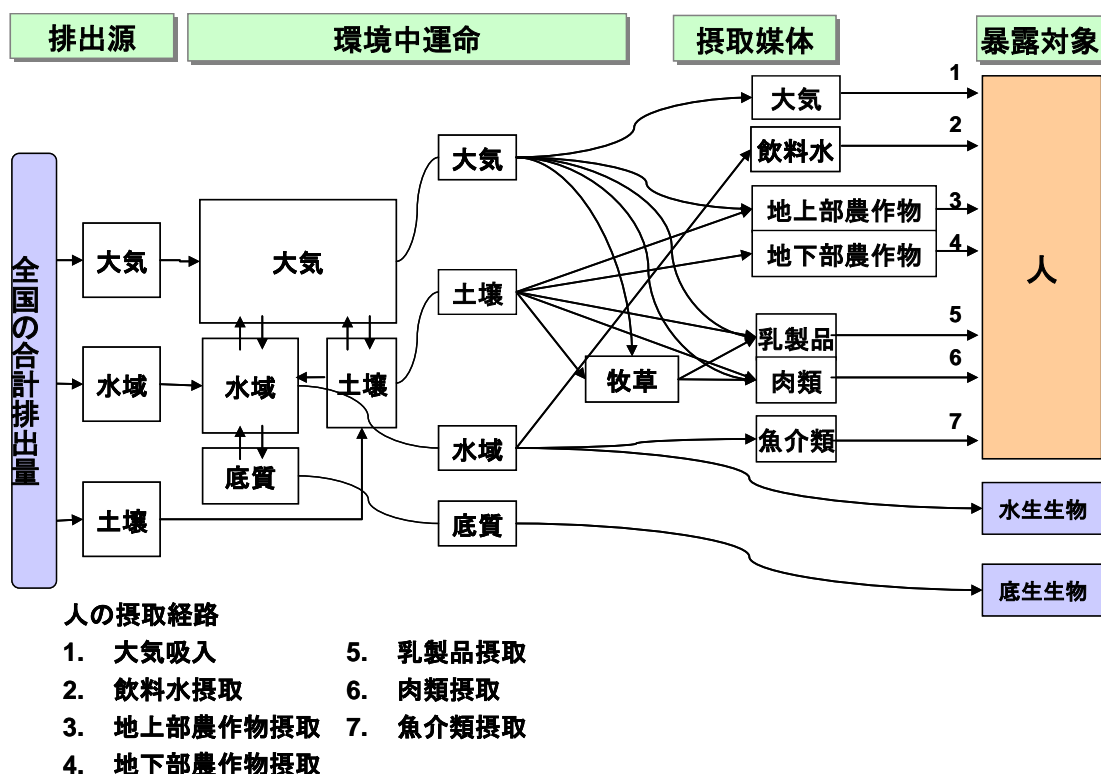
VII.5.2.4 人の摂取量の摂取媒体別比率 (広域・定常状態における)

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、媒体中濃度を求められる。あとは、排出源ごとの暴露シナリオ (V 章) と同じ農作物や畜産物の濃度推計式や人摂取量推計式を用いることで摂取媒体別に摂取量を求めることができる。

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-10 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。

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-8 を参照。

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-10 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 VII-3
 10 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とが
 11 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 M_i 、
 12 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 では化学物質質量
 13 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 における化学物質質量
 14 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る。

15 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 $TEMA : TEMW : TEMS$
 16 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。

17 式 VII-4 の $dM/dt = I + A \cdot M$ の両辺を k 倍すると $d(kM)/dt = kI + A(kM)$ が成り立つこ
 18 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 における化学物質質量
 19 $M_i(t)$ 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 参照）。
 20 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る。

21

22 ②（参考）任意の時刻 t における化学物質質量の導出

23 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 における化学物質質量を導
 24 出する方法を説明する。

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

■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-9 を参照。

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

$A = UA'U^{-1}$ 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。

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

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。

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

各成分の微分方程式

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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。

$$M = UM' \quad \text{これを計算すれば最終的に } M \text{ が求められる。}$$

■次に、具体的な U, U^{-1} の算出方法について説明する。

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

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。

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

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

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。

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

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24

(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)

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。

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 $M_i(t)/M_i$ を「残存比率」と呼ぶ。

残存比率を用いて、例えば図表 VII-11 のような表し方により物質の残留性を視覚的に把握できる。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、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。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。

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

$t = T$ の時の化学物質量を $M|_{t=T}$ で表す。

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

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

初期値条件を考えると、

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

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

$t - T = t'$ (排出停止以降の経過時間) と置き換えれば、

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
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15

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

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

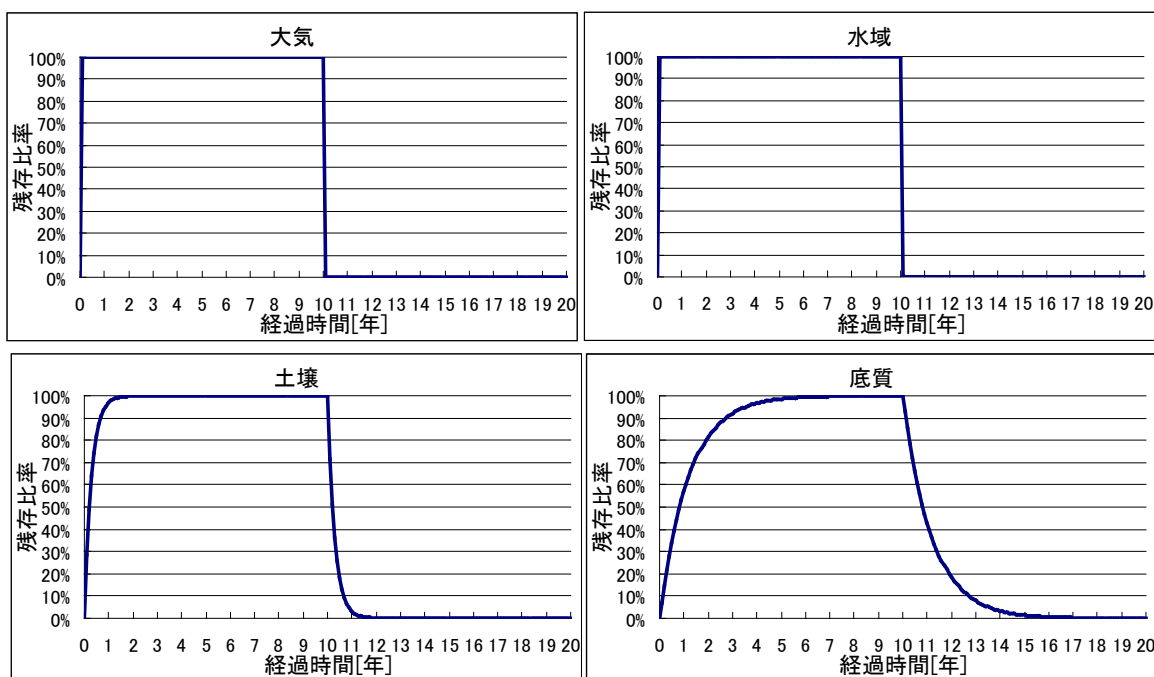
$$M' = \begin{pmatrix} M_1|_{t=T} \times \exp(\lambda_1 t') \\ M_2|_{t=T} \times \exp(\lambda_2 t') \\ M_3|_{t=T} \times \exp(\lambda_3 t') \\ M_4|_{t=T} \times \exp(\lambda_4 t') \end{pmatrix}$$

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

$$M = UM' \quad \text{これを計算すれば最終的に } M \text{ が求められる。}$$

図表 VII-11 は、残存比率の時系列変化を図示化した例である。

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。排出がなくなつ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% 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する時間は裏表の関係がある。



図表 VII-11 各媒体の環境中残存比率の時系列変化の推定の例