

界面活性剤を対象とした産総研-水系暴露解析モデル(AIST-SHANEL)  
による河川水濃度の推定精度向上に関する研究

平成 26 年 3 月



(独)産業技術総合研究所 安全科学研究部門

本研究は、独立行政法人産業技術総合研究所と花王株式会社の平成 23 年度から平成 25 年度の共同研究「界面活性剤等の水系暴露濃度推定に関する研究」の成果の一部をまとめたものである。

界面活性剤を対象とした産総研-水系暴露解析モデル(AIST-SHANEL)による  
河川水濃度の推定精度向上に関する研究

目次

1. 本研究の目的.....	1
2. AIST-SHANEL について .....	1
2.1 解析モデルの概要 .....	1
2.2 検討対象としたパラメータ.....	3
3. AIST-SHANEL による界面活性剤の河川水濃度の推定.....	5
3.1 界面活性剤について .....	5
3.2 河川水濃度の推定精度向上に関する検討.....	5
4. まとめ.....	7
参考文献.....	7

## 1. 本研究の目的

2006年の第一回国際化学物質管理会議で合意された国際的な化学物質管理に関する戦略的アプローチ：Strategic Approach to International Chemicals Management(SAICM)の採択以来、法規制と事業者による自主的な取り組みの両面で化学物質管理のためのリスク評価への動きが活発化している。数多くの化学物質について国内のリスク評価を実施するためには、全国規模の暴露状況を把握することが必要である。しかしながら、モニタリング調査のみでは地点数や調査時期が限られてしまうことから、時間的、空間的な暴露分布の状況を推定するための高精度なモデルが必要とされている。

本研究では、独立行政法人産業技術総合研究所(以下、「産総研」と表記する)が公開している全国の一級水系を対象とした化学物質の河川水濃度の時空間分布を推定できる産総研-水系暴露解析モデル(AIST-SHANEL)Ver.2.5を、消費者製品用の幅広い物性を持つ界面活性剤に適用し、河川水濃度の推定精度向上を図るための方法を検討した。産総研-水系暴露解析モデル(AIST-SHANEL)では、下水処理場を経由しない地先排出量起因の出水時における流達負荷量の推定は、流域内に仮想水路を想定して対象物質による負荷流出特性の違いを掃流係数に代表させて表現している。掃流係数は解析の都度、キャリブレーションが必要なパラメータであり、これまで産総研では有機炭素・水分配係数(Koc)が比較的小さい陰イオン界面活性剤である直鎖アルキルベンゼンスルホン酸塩(LAS)を対象に掃流係数を設定している。本文書は、この範囲にない物質の暴露濃度の推定精度の更なる向上のため、掃流係数のキャリブレーションを実施して推定精度が改善されたので、ここに報告するものである。

## 2. AIST-SHANEL について

### 2.1 解析モデルの概要

産総研-水系暴露解析モデル(AIST-SHANEL)<sup>1)~3)</sup>は、化学物質のリスク評価のための全国109の一級水系を対象とした3次メッシュ(約1km格子)単位かつ月単位の河川水濃度の時空間分布を推定できるモデルである。これまでに、日本石鹼洗剤工業会等で本モデルを適用した界面活性剤の生態リスク評価が行われている<sup>4)~6)</sup>。

本モデルには、3次メッシュ単位の全国の標高、人口、工業統計、土地利用、下水道普及率等の流域情報データが搭載されており、それらのデータに基づいて、河川流量と化学物質の物性を反映した河川水濃度の時空間分布が推定される(図1)。モデルの詳細については既報<sup>1,2)</sup>に記載されている。本モデルの計算に必要な入力データは、降水量や気温などの気象データ、PRTR等から得られる対象化学物質の排出量データ、蒸気圧、分子量、水溶解度、有機炭素・水分配係数(Koc)、河川水や土壌中の生分解半減期および下水処理除去率の値である。これらのデータやパラメータを入力して計算を実行することにより、図2に示すような河川水濃度分布が得られ、リスクが懸念される地域の分布状況を把握することが可能となる。

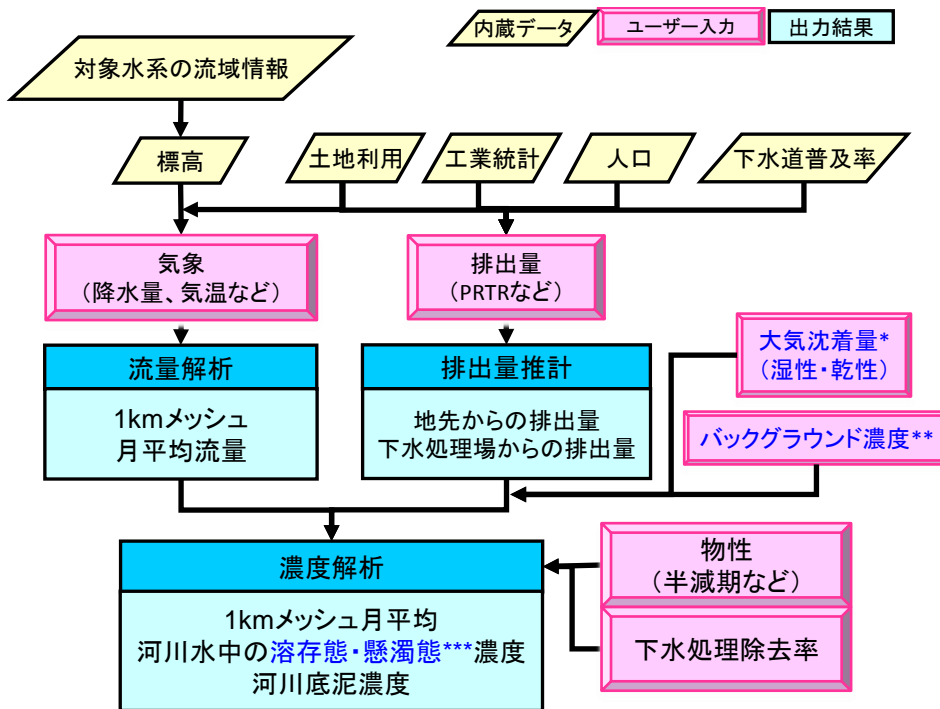


図1 AIST-SHANEL の計算の流れ

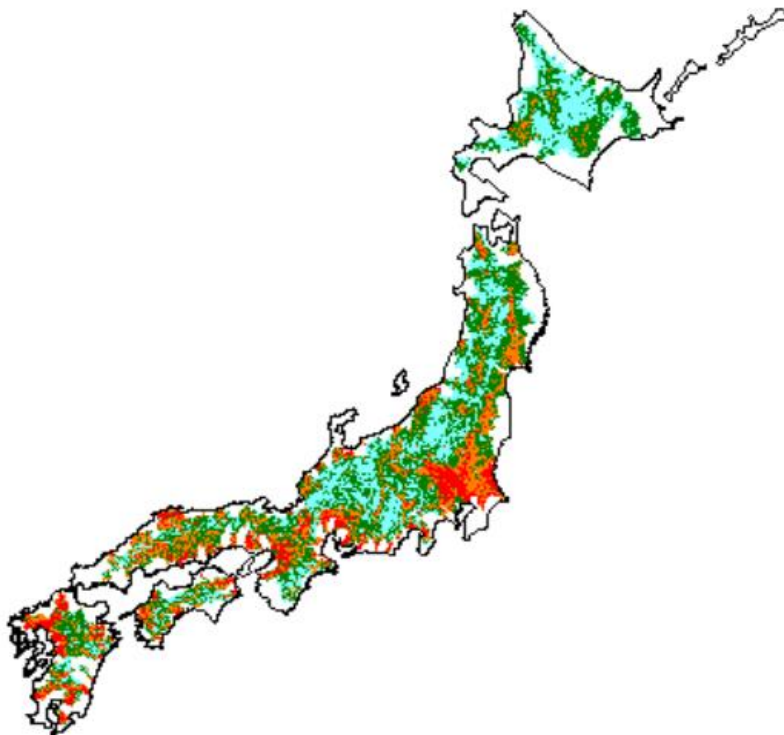


図2 河川水濃度分布の推定結果

## 2.2 検討対象としたパラメータ

本モデルで対象とする環境媒体を図3に示す。メッシュごとに河川水、河川底泥(液相, 固相), 土壌(気相, 液相, 固相), 流域内水路を設定し, 土壌は鉛直方向にA~Dの4層に分割している。

河川水と河川底泥では, 微生物分解による生分解, 河川水と河川底泥間の拡散移動に伴う物質移動, 河川水中における懸濁物質(SS)との吸脱着, SSの沈降および再浮上に伴う物質移動を考慮している。河川水中では, 分配係数に基づき, 対象化学物質の溶存態成分とSSに吸着した懸濁態成分の濃度を推定し, 懸濁態成分は, SSの沈降や再浮上とともに移動するものとしている。土壌においては, 微生物分解による生分解, 移流, 拡散移動に伴う物質移動を考慮している。

流域内水路においては, 下水処理場を経由しない排出量(地先排出量)のうち農薬由来以外の点源や非点源排水に起因するものを流入させており, 溶存態と懸濁態の分配平衡, 微生物分解による生分解, 点源排水による流達過程と堆積掃流過程をモデル化している。堆積掃流過程では, 点源排水により流達し得ない物質(堆積した物質)が出水時に掃流されるとしている。特に, 懸濁物質に吸着しやすい, すなわち有機炭素・水分配係数(Koc)が大きい物質は流域内水路に堆積しやすく, 出水時に一度に掃流され, 河川へ流入する傾向がある。

本モデルでは, 堆積掃流過程による河川への流達負荷量を以下のように定式化している。

$$fr_{np} = kw_{np} S_{np} \frac{q_{al}}{A}$$

$$\frac{dS_{np}}{dt} = (1 - f_p) x_{mp} - fr_{np} - K_{np} S_{np}$$

ここに,  $f_p$ : 点源排水の質量配分率(-),  $x_{mp}$ : 地先排出量( $\text{mg} \cdot \text{s}^{-1}$ ),  $fr_{np}$ : 流達負荷量( $\text{mg} \cdot \text{s}^{-1}$ ),  $S_{np}$ : 堆積負荷量( $\text{mg}$ ),  $kw_{np}$ : 掃流係数( $\text{m}^{-1}$ ),  $q_{al}$ : 流量( $\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ ),  $A$ : 流域面積( $\text{m}^2$ ),  $K_{np}$ : 分解速度( $\text{s}^{-1}$ ), である。

前述のように, 現在公開している掃流係数(公開している AIST-SHANEL Ver.2.5 では「水路底泥の負荷流出係数( $\text{m}^{-1}$ )」と表記されている係数)は, 有機炭素・水分配係数(Koc)が比較的小さい物質を対象にキャリブレーションしたものであり,  $0.01(\text{m}^{-1})$ を設定している。

以下, 異なる吸着性, すなわち, 異なる有機炭素・水分配係数(Koc)を持つ界面活性剤に対する掃流係数を検討した。

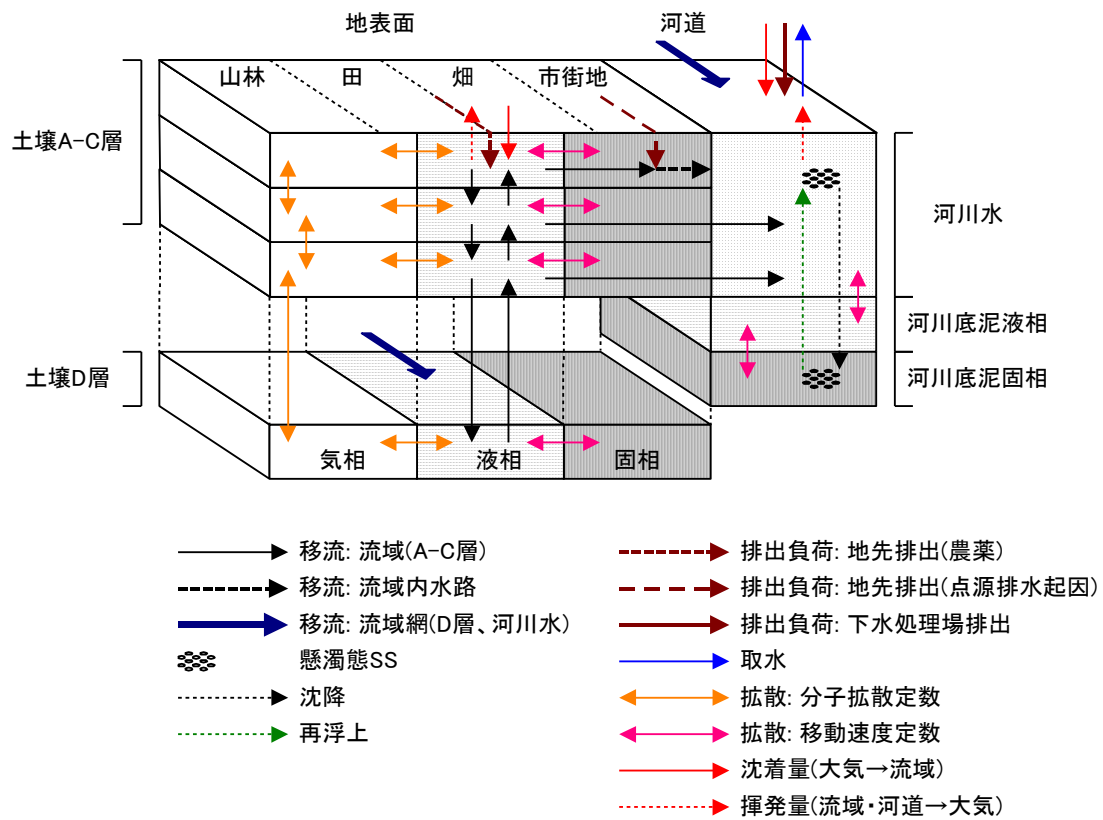


図3 AIST-SHANELで対象とする環境媒体と物質動態

### 3. AIST-SHANEL による界面活性剤の河川水濃度の推定

#### 3.1 界面活性剤について

界面活性剤は、界面(固体、液体および気体のうち、2つの相が互いに接触している境界面)に作用して、性質を変化させる物質の総称である。界面活性剤の化学構造は、1つの分子内に、水になじみやすい「親水基」と、油になじみやすい「親油基または疎水基」の2つの部分があり、本来、水と油のように混じり合わないものを、混ぜ合わせるのに役に立ち、汚れを落とす洗浄の働きなどを発現することが知られている。このような特徴から、界面活性剤は、洗剤、柔軟仕上げ剤、シャンプー、リンスなどの家庭用製品、医薬品、化粧品、食品などの成分として広く使用されている。

界面活性剤は水に溶かしたとき、電離してイオン(電荷をもつ原子または原子団)になるイオン性界面活性剤と、イオンにならない非イオン(ノニオン)界面活性剤に大きく分類される。

イオン性界面活性剤はさらに、水に溶かした時のイオンの種類により、陰イオン(またはアニオン)界面活性剤、陽イオン(またはカチオン)界面活性剤、および両性(またはベタイン)界面活性剤に分類される。

このように界面活性剤には多くの種類が存在し、それぞれ「親水基」と「疎水基」の組合せの違いにより、使用目的に合った物性(洗浄、乳化、分散、吸着、柔軟作用など)に制御し、我々の身近な製品の成分の1つとして利用されている。

#### 3.2 河川水濃度の推定精度向上に関する検討

洗剤等の消費者製品用に配合されている化学物質は、家庭で使用された後、主に下水処理場や合併浄化槽等を経由して河川等に排出される。一般に、河川水などに存在する化学物質の実態把握は、環境濃度測定により行われることが多いが、数多くの化学物質に対して全国規模の存在実態を明らかにするには、環境濃度推定モデルを用いることが有効と考えられる。

産総研-水系暴露解析モデル(AIST-SHANEL)は、衣料用洗剤に用いられる代表的な陰イオン界面活性剤である直鎖アルキルベンゼンスルホン酸塩(LAS)に適用され、日本全国の河川水中の化学物質濃度把握における有用性が既に報告<sup>2,4)</sup>されているが、物性が大きく異なる他の界面活性剤には適用されていない。そこで、化学物質の環境挙動に影響を与えることが知られている吸着性に着目し、その指標である有機炭素・水分配係数(Koc)が異なる

- ・ 陰イオン界面活性剤(Koc :  $2.50 \times 10^3$ )
- ・ 非イオン界面活性剤(Koc :  $6.50 \times 10^3$ )
- ・ 陽イオン界面活性剤(Koc :  $5.08 \times 10^6$ )

について、AIST-SHANEL による河川水濃度推定の妥当性を検証した。

検証に用いた界面活性剤(陰イオン、非イオン、陽イオン)の実測環境濃度は、日本石鹼洗剤工業会等から報告されている日本の代表的な都市河川(4河川7地点)における年4回の測定値の年間平均値(3年分)を使用した<sup>7)</sup>。また、それぞれの界面活性剤の環境排出量はPRTR情報等から設定した。



各界面活性剤の河川水濃度について、それぞれ各調査地点における AIST-SHANEL 推定値を実測値と比較した。ここで、推定値の妥当性を検証する指標として、推定値を実測値で除した値を一致度と定義して使用した。すなわち、一致度は 1 に近づくほど推定値が実測値に整合していることを示し、1 より大きい値であれば推定値が実測値より高く、1 より小さい値であれば推定値が実測値より低いことを示している。

それぞれの界面活性剤について、掃流係数を  $0.01(\text{m}^{-1})$  から  $100(\text{m}^{-1})$  の間で変動させて、各調査地点の一致度を求めた結果、陰イオン界面活性剤、および非イオン界面活性剤では掃流係数の変動が一致度に与える影響は小さく、この範囲の掃流係数であれば何れも実測値に近い推定値が得られた。これは、現在の AIST-SHANEL に設定している掃流係数が妥当であることを示唆するものである。一方、陽イオン界面活性剤では掃流係数の変動が一致度に与える影響が大きい地点が存在し、掃流係数  $30(\text{m}^{-1})$  付近で推定値は実測値に整合する結果が得られた(図 4)。

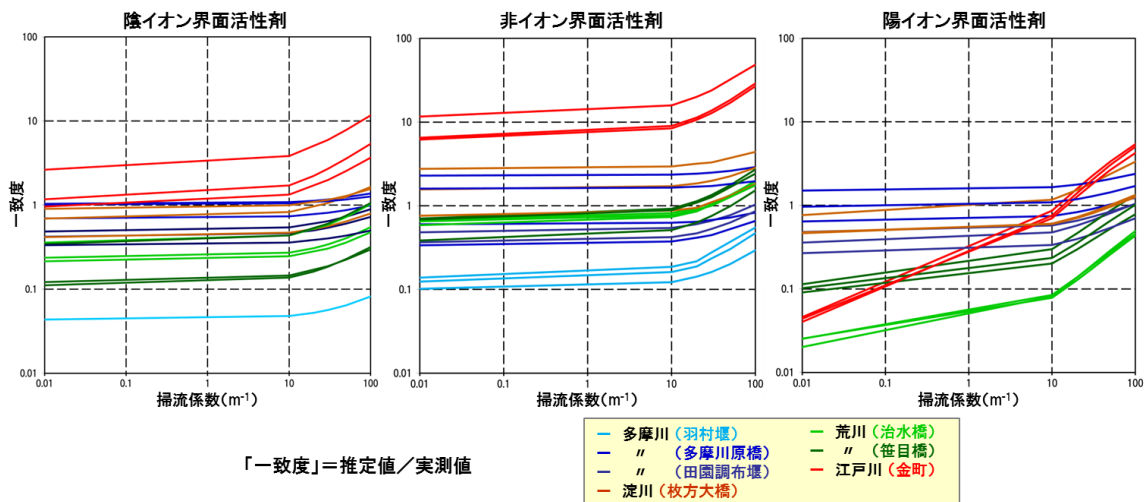


図 4 掃流係数による推定値と実測値の一致度の変化

陽イオン界面活性剤( $K_{oc} : 5.08 \times 10^6$ )において、掃流係数の変更により一致度が特に大きく変動した地点は、江戸川(金町)、荒川(治水橋、笹目橋)であった。これらの地点は、その他の調査地点である多摩川(羽村堰、多摩川原橋、田園調布堰)、淀川(枚方大橋)に比べ、吸着性の高い陽イオン界面活性剤が、本モデルで設定している流域内水路中の底泥に吸着する割合が多く、堆積掃流過程における掃流係数の変動が、AIST-SHANEL の推定値に与える影響が大きかったことが示唆される。

これに対し、吸着性の低い陰イオン界面活性剤( $K_{oc} : 2.50 \times 10^3$ )および非イオン界面活性剤( $K_{oc} : 6.50 \times 10^3$ )では、本モデルで設定している流域内水路中の底泥に吸着、堆積しにくいため、掃流係数の変動による寄与が小さいと考えられた。

#### 4. まとめ

産総研-水系暴露解析モデル(AIST-SHANEL)では、下水処理場を経由しない地先排出量起因の出水時における流達負荷量の推定は、流域内に仮想水路を想定して対象物質による負荷流出特性の違いを掃流係数に代表させて表現している。掃流係数は解析の都度、キャリブレーションが必要なパラメータであり、これまで産総研では有機炭素・水分配係数(Koc)が比較的小さい陰イオン界面活性剤である直鎖アルキルベンゼンスルホン酸塩(LAS)を対象に掃流係数を設定している。本研究において、この範囲にない物質の暴露濃度の推定精度の更なる向上のため、掃流係数のキャリブレーションを実施して推定精度が改善された。

本研究では、吸着性が異なる複数の界面活性剤(陰イオン、非イオン、陽イオン)を対象にして掃流係数を検討した結果、吸着性の高い陽イオンの界面活性剤は、掃流係数を  $30(\text{m}^{-1})$  程度にすれば、河川水濃度が良好な精度で推定できることを示した。

#### 参考文献

- 1) 石川百合子・東海明宏(2006)河川流域における化学物質リスク評価のための産総研-水系暴露解析モデルの開発, 水環境学会誌, 29, 797-807.
- 2) 石川 百合子, 川口 智哉, 東野 晴行(2012) 産総研-水系暴露解析モデル(AIST-SHANEL)による日本全国の1級水系を対象とした化学物質濃度の推定, 水環境学会誌, 35, 65-72.
- 3) 独立行政法人産業技術総合研究所安全科学研究部門 HP 産総研-水系暴露解析モデル <http://www.aist-riss.jp/projects/AIST-SHANEL/>
- 4) 山本昭子, 西山直宏, 吉田浩介, 山根雅之, 石川 百合子, 三浦千明(2010): 直鎖アルキルベンゼンスルホン酸塩(LAS)の水圏生態リスク評価, 水環境学会誌, 33, 1-10.
- 5) 日本石鹼洗剤工業会(2010) アミノキシドのヒト健康影響と環境影響に関するリスク評価結果について [http://jsda.org/w/01\\_katud/jsda/jsda\\_AO\\_20100531.pdf](http://jsda.org/w/01_katud/jsda/jsda_AO_20100531.pdf)
- 6) 日本石鹼洗剤工業会(2011) ポリオキシエチレンアルキルエーテル硫酸塩(AES)のヒト健康影響と環境影響に関するリスク評価結果について [http://jsda.org/w/01\\_katud/jsda/jsda\\_AES\\_201112.pdf](http://jsda.org/w/01_katud/jsda/jsda_AES_201112.pdf)
- 7) 日本石鹼洗剤工業会 (2013) 環境年報, 38, 7-19.