数量化分析を用いた 環境中化学物質濃度区間の推定

東海 明宏¹⁾, 長屋 圭治²⁾, 湯浅 晶³⁾

¹⁾ 岐阜大学工学部 (〒501-11 岐阜市柳戸 1-1)

(現所属 横浜国立大学環境科学研究センター 〒240 横浜市保土ヶ谷区常盤台156)

²⁾ 岐阜大学大学院工学研究科

³⁾ 岐阜大学流域環境研究センター (〒501-11 岐阜市柳戸 1-1)

[平成 8 年 5 月 27 日受理]

Estimation of the Range of the Ambient Environmental Concentration of Chemicals based on Quantification Theory Type II

Akihiro TOKAI¹⁾, Keiji NAGAYA²⁾ and Akira YUASA³⁾

^{1), 2)} Gifu University (1-1 Yanagido, Gifu 501-11)

¹⁾ Institute of Environmental Science and Technology, Yokohama National University
(156 Tokiwadai, Hodogaya-ku, Yokohama 240)

³⁾ Center for River Basin Environmental Research, Gifu University
(1-1 Yanagido, Gifu 501-11)

[Received May 27, 1996]

Summary

Monitoring of chemicals have been conducted in many places along Japan. An application of a statistical model for the prediction of the range of concentrations of chemicals in the water environment by utilizing these monitoring data was investigated in the present study. The quantification theory type II was applied for the analysis, and the six items were selected as the explanatory functions, i.e., way of usage, way of consumption, water solubility, *n*-octanol/water partition coefficient, biodegradability, and load of chemicals. It was found by the analysis of monitoring data that load of chemicals, way of usage and way of consumption were the major determinants of the range of concentration in water environment, while the *n*-octanol/water partition coefficient was the major one in the sediment. The developed model was applied to the rest of data not incorporated in the analysis. The estimated values were within one to two orders of difference from the monitoring data.

Key words: Statistical model, quantification theory type II, chemicals

1. 本研究の背景と目的

環境中化学物質は、全国的に定点観測¹⁾がなされているもののそのデータについては必ずしも十分に活用されているわけではない。化学物質濃度の観測値は、発生源、伝播過程、観測時期などの要因で変動すると考えられる。少数の支配的な要因で観測地点における化学物質の濃度水準を推定することができれば、実際に観測を行うかどうかの判断をするうえで有用である。本研究では、化学物質の環境中濃度区間を推定するための統計モデルの適用について検討した。手法としては数量化分析Ⅱ類を用い、実測データのうち一部の物質のデータを用いて水、底泥中化学物質濃度区間を判別する式を導出し、ついでその式を用いて残りの物質（未観測物質）の濃度区間の推定を行って実測データと比較した。本手法の特徴は、物質収支則にもとづいたモデルには利用可能ではない程の、定性的なデータも利用可能となる点である。対象とする化学物質の数が多く、しかも毎年増えつづけている現状をみると、公表されているデータや容易に入手できるデータで環境中濃度水準を判別できれば、環境調査等を行うか否か等の要注意物質のスクリーニングにきわめて有効である。数量化分析を用いた例としては、判別分析を水中化学物質濃度、底泥中化学物質濃度に適用し、予測能力について検討したものがあ²⁾。本研究は基本的には既往研究²⁾にしたがったものではあるが、特にその後の約10年間に観測がなされたデータを加えて考察したものである。

2. 分析方法

本研究の分析の流れは次の通りである。まず、環境庁によって環境調査がなされた物質の環境中濃度の観測値と、その化学物質の消費特性に関するデータを、数量化分析を適用できるように、アイテム及びカテゴリに分類する。

ここでは、化学物質の環境中濃度と化学物質の消費過程の関係を定性的に明らかにすることを目的とし、外的基準を化学物質の環境中濃度水準にとり、説明変数に化学物質の消費特性に関する幾つかの要因を用い、数量化分析Ⅱ類を適用した。

化学物質の使用、消費、物理化学性状値に関するデータによって、観測地点別に水中化学物質濃度、底泥中化学物質濃度の分析をし、それぞれ化学物質の環境中濃度を規定する消費特性上の要因を抽出した。

つづいて未観測物質の濃度水準の予測の例として、判別式の導出においては用いなかった過去において測定された化学物質の環境中濃度を推定した。

2. 1 数量化分析Ⅱ類

本研究で用いた数量化分析Ⅱ類^{3, 4)}とは、標本が持つ定性的なデータに実数を割り当てることによってサンプルの分類を数量的に行う多変量解析の1つである。

説明変数である*i*番目のアイテム内の*j*番目のカテゴリにダミー変数 X_{ij} を割り当てる。分析対象の化学物質についてこのダミー変数に該当する場合には1、該当しなかった場合には0を与える。各ダミー変数に重み係数であるカテゴリ・ウェイト a_j を掛け合わせ線形結合させたものが、線形判別式(1)である。

$$Y = \sum_{j=1}^n a_j x_{ij} \dots\dots\dots (1)$$

ここで Y は外的基準と呼ばれ、本研究では、化学物質の環境濃度水準にあたる。 a_j は外的基準を最も良く判別するという観点から、標本の全変動と濃度区間毎に分類された各群に属する標本の群間変動の比である相関比を最大にするように算出される。この計算の詳細は文献^{3, 4)}を参照されたい。したがって、各アイテムのカテゴリ・ウェイトの最大値と最小値の差(レンジ)が大きいもののほど、外的基準の判別に大きな影響を与えているアイテムといえる。この値を用いて、環境中濃度を規定する説明変数(化学物質の各種の特性値)を決定する。

つづいて、得られた線形判別式を用いて、環境中濃度の観測値のない化学物質の濃度区間を推定する。

2. 2 化学物質環境濃度水準の説明変数

化学物質の環境濃度の説明変数として次の6つの要因を取り上げた。それらは化学物質の使用形態、消費形態、水溶解度、*n*-オクタノール/水分配係数、生分解性、環境への流入負荷である。外的基準として水中化学物質濃度、底泥中化学物質濃度をとりあげた。

2. 2. 1 化学物質の使用形態

使用形態として、生産工程や対象物質が製品化される際、環境に容易には漏洩しない用途を密閉型、環境に直接散布される化学物質を開放型とした。前者の例として作業媒体、合成物質の中間体、後者の例として洗剤や農薬などが該当する。また、両者のいずれかには分類しがたい化学物質を中間型とした。例えばこれには、製品に添加されている物質が該当するとした。

2. 2. 2 化学物質の消費形態

消費形態とは、対象物質を含んだ製品が環境に対してどのように消費されるかという観点から、消費された場所、消費現場の空間的な広さに注目し、農業系、工業薬品原料系、家庭消耗品系、一般工業製品添加物系の4カテゴリに分類した。

2. 2. 3 物理化学性状

物理化学性状値として水溶解度, *n*-オクタノール/水分配係数を取りあげた。それぞれ水系に進入した化学物質が水相に滞留しやすいか, または固相に分配しやすいかの程度を示す量である。水溶解度は3カテゴリに一定のレベル幅を定めて分類した。*n*-オクタノール/水分配係数は4カテゴリに一定のレベル幅を定めて分類した。

2. 2. 4 化学物質の環境中での生分解性

生分解性は, 対象となる化学物質が環境中で分解されやすいか否かで分類した。

2. 2. 5 観測点への化学物質の流入負荷

流入負荷は, 全人口に対する測定点の周辺地域の人口の比率を対象物質の日本全国での年間生産量に乗ずることで推定した。求めた人口比率を各物質の年間生産量に乗じて流入負荷を推定した。流入負荷についても一定のレベル幅を設定し5カテゴリに分類した。

3. 事例適用

3. 1 解析対象のデータの整理

本分析の対象地点は環境庁による調査結果において比較的検出率が高い多摩川河口, 荒川河口, 横浜港, 鶴見川河口, 名古屋港, 大阪港, 洞海湾の7地点とした。水中化学物質濃度, 底泥中化学物質濃度の観測値は環境庁による測定値を利用した¹⁾。解析に用いた物質をTable 1に示す。ここで取上げた物質は, 原料, 中間体が多く,

製品として消費され, 環境に負荷された物質はTCP, クロロデンぐらいである。その意味から物質の選択においてやや偏りがあるといえるが, 現時点で環境観測値があるという条件を満たすうえではやむをえないと考える。また, 化学物質の水溶解度, *n*-オクタノール/水分配係数, 生産量, 用途, 分解性は文献^{5, 6)}から整理し, 流入負荷は先に示した方法で得られる推定値を用いた。

3. 2 数量化分析適用にあたっての仮定

まず, 各地点毎に分析を実施するにはデータが少なかつたため, 用いた7地点のデータをひとまとめにして解析を行った。したがって, この場合の解析においては, 日本全国を1つの母集団と考えてその中から7地点での標本を抽出したことに相当する。また, 取上げた説明変数は, 互いに独立であると仮定し, カテゴリの設定については, それらに該当するサンプルの数に偏りがでないようにしてきめた。ここで, 水溶解度と*n*-オクタノール/水分配係数を独立とすることは, 従来これら2つの間の相関式に関する検討からみて不自然ではあるが, 本分析でとりあげた物質でもある程度の相関が認められたが, 底泥中化学物質濃度推定のための説明変数として重要と考えたため, これら2つを独立として扱った。

つづいて, 同様な分析を各地点毎に分析を行った。概略, 標本数は7分の1前後に減少する。

各アイテムのカテゴリ数が, 該当するデータ数に比して妥当であるか等の統計的な検討は, ここでは行っていない。

Table 1 Chemicals employed for analysis

Name of chemicals	Water solubility ^{a)} [μg/ml]	<i>n</i> -octanol/water partition coeff. ^{a)} [log Pow]	Usage ^{a)}	Production amount ^{a)} [t/year]	Degradability ^{a)}
Acetonitrile	Soluble in water	-0.34	Raw material for bitamine B1 and sulfa drugs	1,750	○
Aniline	34,000	0.84	Chemicals used for gum	105,934[1986]	○
Xylene	159	3.04	Chemicals used for gum	1,570,236[1986]	○
Chlordane	0.056	5.03	Termite	1,320	×
<i>o</i> -chloroaniline	3,800	1.9	Intermediates for dyestuffs	500[1985]	×
<i>p</i> -chloroaniline	Hardly soluble	1.83	Intermediates for dyestuffs	0[1985]	×
Cyclohexyl amine	Easily soluble	1.49	Chemicals used for gum	3,550	○
Diphenyl amine	300	3.36	Chemicals used for gum and dyestuffs	3,000[1985]	×
<i>N,N</i> -dimethyl formamide	Soluble	-0.73	Synthetic leather and fiber	34,000[1985]	×
Toluene	547	2.7	Dyestuffs, perfume and gunpowder	830,294	○
2-naphthyl amine	1,700	2.2	Raw materials and dyestuffs	0[after 1972]	×
<i>p</i> -nitro toluene	160	2.43	Intermediates for dyestuffs	1,800	×
Nitrobenzene	1,780	1.8	Dyestuffs	97,355	×
Pyridine	65	0.84	Pharmaceuticals and solvent	4,000	○
Benzene	1,790	2.13	Dyestuffs, synthetic gum and detergent	2,260,944	○
Tri-cresyl phosphate	less than 20	5.10	Plasticizers for polyvinyl chloride	4,724	○

a) kankyokagacubbushitsu youran

Table 2 Categories for the concentration of chemicals in water

	Concentration [$\mu\text{g}/\text{ml}$]
1	$\sim \leq 0.00001$
2	$0.00001 < \sim \leq 0.00005$
3	$0.00005 < \sim \leq 0.0005$
4	$0.0005 < \sim$

Table 3 Categories for the concentration of chemicals in sediment.

	Concentration [$\mu\text{g}/\text{g-dry}$]
1	$\sim \leq 0.01$
2	$0.01 < \sim \leq 0.04$
3	$0.04 < \sim \leq 0.1$
4	$0.1 < \sim$

Table 4 Categories of explanatory variables

Items	Categories
Way of usage	1. Closed usage
	2. Intermediate type of usage
	3. Open usage
Way of consumption	1. Agricultural chemicals
	2. Industrial chemicals
	3. Household chemicals
	4. Additives
Water solubility [%]	1. $\sim \geq 1000$
	2. $1 < \sim \leq 1000$
	3. $\sim \leq 1$
n-octanol/water partition coefficient [$\log P_{ow}$]	1. $\sim \leq 1$
	2. 2
	3. 3
	4. $4 \leq \sim$
Degradability in environment	1. Easily degradable
	2. Hardly degradable
Environmental load of chemicals [kg/day]	1. $\sim \leq 10$
	2. $10 < \sim \leq 100$
	3. $100 < \sim \leq 1000$
	4. $1000 < \sim \leq 10000$
	5. $10000 < \sim$

数量化分析Ⅱ類に用いた外的基準の環境中濃度区間と、各変数であるアイテム、カテゴリをTable 2, 3, 4に示す。数量化分析Ⅱ類は岐阜大学情報処理センターに備えられている統計分析用ソフトウェアANALYSTを用いた⁷⁾。

解析に用いたデータの水質データのクロス集計表をTable 5に、底質データをTable 6に示す。

4. 結果及び考察

4. 1 全地点まとめた場合の濃度の規定要因

水質データを用いた場合の数量化Ⅱ類による分析結果をTable 7に示す。この結果より、水中化学物質濃度水準の規定要因としては、化学物質の水域への放出負荷量、使用形態、消費形態が強いことがわかった。

同様に底質データについて得られた分析結果をTable 8に示す。底泥中化学物質濃度に関しては、水溶解度とn-オクタノール/水分配係数が強く効いていることがわかった。水試料での結果と比較すると、使用形態はそれほど強い要因としては効いてはいなかった。

ここで得られた結果を化学物質の環境動態過程にそって説明してみる。まず、環境中に排出された化学物質が観測地点まで到達するには、次の3通りの場合が考えられる。第一に、生産・消費過程において大気に揮発し、大気から観測地点に乾性沈着、湿性沈着により供給される分である。第二に、水系に直接排出される分である。第三に懸濁物質等の固体相を輸送媒体にして観測地点にまで到達する場合である。したがっていずれの場合もいったん水中に貯留するため、環境への進入のしやすさを表している使用形態や消費形態が水質に関してきいてくるとの結果がでたものと考えられる。つづいて、水中に進入した物質はn-オクタノール/水分配係数に支配されて水と懸濁物質に再分配し、懸濁物質が沈殿することで底泥に化学物質が供給される。したがって、n-オクタノール/水分配係数が効いてくるのではないかと考えられる。

4. 2 各地点毎での化学物質濃度推定

各地点毎での分析結果をTable 9, 10, 11に示す。Table 9では、多摩川河口での水質データへの適用結果である。データ数は少ないが、4. 1での水質データの場合とはほぼ同傾向の結果である。ただし、放出負荷の寄与が消失した結果を得た。この点について理由は明確にはなっていないが、同一地点での分析においては各物質とも放出負荷を求める上で同一の重み係数を用いている点に関連していると思われる。他の地点については、水質に関しTable 10に、底質に関しTable 11に各アイテムのレンジの値を順位によってしめた。水質データの場合、得られた結果は、概ね4. 1での結果と一致してお

Table 5 Data of water samples prepared for analysis.

		Concentration in water				Way of usage			Way of consumption				Water solubility			n-octanol/water partition coef.				Degradability		Chemical load				
		1	2	3	4	1	2	3	1	2	3	4	1	2	3	1	2	3	4	1	2	1	2	3	4	5
Concentration in water	1	8																								
	2	0	21																							
	3	0	0	5																						
	4	0	0	0	16																					
Way of usage	1	0	7	4	5	16																				
	2	2	10	1	5	0	18																			
	3	6	4	0	6	0	0	16																		
Way of consumption	1	0	4	0	0	0	0	4	4																	
	2	1	14	5	8	15	13	0	0	28																
	3	1	2	0	6	0	3	6	0	0	9															
	4	6	1	0	2	1	2	6	0	0	0	9														
Water solubility	1	0	0	2	8	5	5	0	0	8	0	2	10													
	2	1	14	3	2	10	6	4	4	16	0	0	0	20												
	3	7	7	0	6	1	7	12	0	4	9	7	0	0	20											
n-octanol/water partition coefficient	1	0	6	5	12	14	3	6	0	14	6	3	8	8	7	23										
	2	1	7	0	3	2	9	0	0	11	0	0	2	5	4	0	11									
	3	0	6	0	1	0	3	4	4	3	0	0	0	7	0	0	0	7								
Degradability in environment	4	7	2	0	0	0	3	6	0	0	3	6	0	0	9	0	0	0	9							
	1	0	8	5	6	14	5	0	0	18	0	1	7	11	1	15	1	3	0	19						
Chemical load to environment	2	8	13	0	10	2	13	16	4	10	9	8	3	9	19	8	10	4	9	0	31					
	1	6	2	0	0	2	0	6	0	1	0	7	0	1	7	1	1	0	6	1	7	8				
	2	1	13	4	3	12	5	4	4	16	1	0	3	13	5	11	5	4	1	11	10	0	21			
	3	1	4	0	3	2	6	0	0	5	2	1	3	3	2	3	3	0	2	2	6	0	0	8		
	4	0	0	1	5	0	3	3	0	2	3	1	3	0	3	5	1	0	0	1	5	0	0	0	6	
	5	0	2	0	5	0	4	3	0	4	3	0	1	3	3	3	1	3	0	4	3	0	0	0	0	7

Table 6 Data of sediment samples prepared for analysis.

		Concentration in sediment				Way of usage			Way of consumption				Water solubility			n-octanol/water partition coef.				Degradability		Chemical load				
		1	2	3	4	1	2	3	1	2	3	4	1	2	3	1	2	3	4	1	2	1	2	3	4	5
Concentration in sediment	1	29																								
	2	0	23																							
	3	0	0	16																						
	4	0	0	0	8																					
Way of usage	1	2	11	6	1	20																				
	2	12	10	8	3	0	33																			
	3	15	2	2	4	0	0	23																		
Way of consumption	1	11	0	0	0	0	0	11	11																	
	2	11	18	10	4	20	23	0	0	43																
	3	3	1	3	4	0	5	6	0	0	11															
	4	4	4	3	0	0	5	6	0	0	0	11														
Water solubility	1	2	3	6	3	4	10	0	0	12	0	2	14													
	2	12	11	6	1	12	14	4	4	23	0	3	0	30												
	3	15	9	4	4	4	9	19	7	8	11	6	0	0	32											
n-octanol/water partition coefficient	1	1	9	10	7	13	8	6	0	19	6	2	11	10	6	27										
	2	4	8	3	1	7	9	0	0	16	0	0	3	5	8	0	16									
	3	10	1	1	0	0	8	4	4	8	0	0	0	12	0	0	0	12								
	4	14	5	2	0	0	8	13	7	0	5	9	0	3	18	0	0	0	21							
Degradability in environment	1	6	12	7	3	13	15	0	0	25	0	3	10	18	0	19	1	5	3	28						
	2	23	11	9	5	7	18	23	11	18	11	8	4	12	32	8	15	7	18	0	48					
Chemical load to environment	1	5	6	1	0	6	0	6	0	6	0	6	1	1	10	0	6	0	6	0	12	12				
	2	12	11	5	0	11	6	11	11	15	1	1	2	14	12	10	5	4	9	11	17	0	28			
	3	5	3	5	2	3	12	0	0	8	4	3	2	9	4	4	3	2	6	5	10	0	0	15		
	4	1	2	5	3	0	8	3	0	7	3	1	8	0	3	10	1	0	0	6	5	0	0	0	11	
	5	6	1	0	3	0	7	3	0	7	3	0	1	6	3	3	1	6	0	6	4	0	0	0	0	10

Table 7 Results of the analysis with the example of water sample.

Items	Category	Category weight		Range
		Frequency	Weight	
Way of usage	1	16	-1.292	2.400
	2	18	1.108	
	3	16	0.045	
Way of consumption	1	4	1.133	2.246
	2	28	0.374	
	3	9	-0.556	
	4	9	-1.113	
Water solubility	1	10	-0.888	1.392
	2	20	0.504	
	3	20	-0.060	
n-octanol-water partition coefficient	1	23	0.461	1.855
	2	11	-0.828	
	3	7	-1.136	
	4	9	0.719	
Degradability in environment	1	19	0.235	0.379
	2	31	-0.144	
Load of chemicals to environment	1	8	2.068	3.300
	2	21	0.089	
	3	8	-0.396	
	4	6	-1.103	
	5	7	-1.231	

Table 8 Results of the analysis with the example of sediment sample.

Items	Category	Category weight		Range
		Frequency	Weight	
Way of usage	1	20	.182	0.313
	2	33	-0.130	
	3	2	.029	
Way of consumption	1	11	0.613	1.319
	2	43	0.200	
	3	11	-0.706	
	4	11	-0.688	
Water solubility	1	14	0.062	0.120
	2	30	0.033	
	3	32	-0.058	
n-octanol-water partition coefficient	1	27	-1.020	2.247
	2	16	-0.465	
	3	12	0.768	
	4	21	1.227	
Degradability in environment	1	28	-0.177	0.280
	2	48	0.103	
Load of chemicals to environment	1	12	-0.015	0.672
	2	28	-0.145	
	3	15	-0.185	
	4	11	0.196	
	5	10	0.487	

り、地点毎の差違は明確ではなかった。底質データの場合も同様に4. 1での結果と一致していた。以上のことから、水、底泥中の化学物質の濃度区間を説明する要因の順位が明らかとなった。

次にここで得られた判別式を、Table 12に示した物質について適用した。すなわち、あらかじめ解析対象デー

Table 9 Results of water samples in Tama River.

Items	Category weight			
	Category	Frequency	Category weight	Range
Way of usage	1	2	0.632	2.214
	2	3	0.632	
	3	2	-1.581	
Way of consumption	1	1	1.107	4.427
	2	4	-1.107	
	3	1	3.320	
	4	1	-	
Water solubility	1	1	0.000	0.000
	2	4	0.000	
	3	2	-	
n-octanol/water partition coefficient	1	4	0.0	0.0
	2	2	-	
	3	1	-	
	4	0	-	
Degradation in environment	1	2	0.0	0.0
	2	5	-	
Load of chemicals to environment	1	0	-	0.0
	2	4	0.0	
	3	1	-	
	4	1	-	
	5	1	-	

タを2群にわけ、一部を判別式の導出に、それ以外を推定用に残しておき、後者のデータを未観測物質とみなして、判別式から得られる推定値との比較をした。ここでの推定用の物質としては、各地点毎で最も最近に測定された物質とした。底泥中化学物質の推定値と観測値との比較をFig.1に示した。観測値と推定値の比は1から2オーダーにかけて分布している。今回の推定結果は実観測値に対して濃度レベルが各地点ともに概ね低めに推定される傾向にあった。また、横軸のn-オクタノール/水分分配係数が大きくなるほど値がばらつく傾向にあった。

本研究において水中、底泥中化学物質濃度区間を推定する方法を数量化分析Ⅱ類を用いて検討した。実際環境中での化学物質濃度を精度よく観測することの重要性は論をまたないが、同時に観測値を活用する、すなわちいかに説明するかという観点からは、n-オクタノール/分配係数といった物理化学性状値のみならず、化学物質の消費、廃棄形態という因子の推定精度を向上させることが重要であるとのことが確かめられたといえる。

要 約

環境中化学物質は、全国的に定点観測がなされてはい

Table 10 Rank of categories in the concentration of water.

Item	Tama river	Ara river	Yokohama port	Tsurumi river	Nagoya port	Osaka port	Doukai bay
Way of usage	2	2	3	1	1	2	2
Way of consumption	1	1	1	2	2	1	3
Water solubility	2	—	2	—	3	3	1
n-octanol/water partition Coefficient	—	—	4	—	—	—	4
Degradability	—	—	—	—	—	—	—
Load of chemicals	—	—	—	—	—	—	—

Table 11 Rank of categories in sediment samples.

Item	Tama river	Ara river	Yokohama port	Tsurumi river	Nagoya port	Osaka port	Doukai bay
Way of usage	2	4	1	2	3	5	2
Way of consumption	2	1	—	2	2	3	3
Water solubility	3	3	2	1	1	2	4
n-octanol/water partition Coefficient	1	2	2	—	3	1	1
Degradability	—	—	—	—	4	6	—
Load of chemicals	—	—	—	—	—	4	—

Table 12 Chemicals and evaluated points.

Points	Substance
Tama River	Aniline
Ara River	Pyridine
Yokohama Port	Toluene
Tsurumi River	Acetonitrile
Nagoya Port	Tricresyl phosphate
Osaka Port	n,n-dimethylformamide
Dokai Bay	Tricresyl phosphate

るもののそのデータについては必ずしも十分に活用されているわけではない。本研究では、化学物質環境濃度水準を推定するための統計モデルの適用について検討した。手法としては、数量化分析Ⅱ類を用い、説明変数として使用形態、消費形態、水溶解度、 n -オクタノール／水分配係数、生分解性、流入負荷を取り上げた。公表されたデータの一部を使って水中ならびに底泥中化学物質濃度水準を判別する式を導出した結果、水中化学物質濃度の判別においては、水域への流入負荷、使用形態、消費形態がきいており、底泥中化学物質濃度水準の判別には n -オクタノール／水分配係数がきいていることがわかった。得られた判別式を用いて残りのデータの推定

Fig. 1 Comparison between estimated value/observed value and n -octanol water partition coefficient in sediment

を行ったところ、観測値と推定値の比は1から2オーダーの範囲にかけばついた。

文 献

- 1) 環境庁環境保健部保健調査室編：化学物質と環境，昭和54～55年，57～63年，平成元年～6年度版
- 2) Morioka, T.(1985) Approaches to Environmental Modelling of Fate of chemicals in Japan, Proc of

- workshop on Environmental Modelling for Priority Setting Among Existing Chemicals ,GSF-Bericht, Ecomed Press, pp.78-147 (1985)
- 3) 有馬哲, 石村貞夫: 多変量解析のはなし, 東京図書, (1993)
- 4) 河口至商: 多変量解析入門Ⅱ, 森北出版, 1978
- 5) 環境庁環境化学物質研究会編: 環境化学物質要覧, 丸善, 平成2年
- 6) 化学工業日報社: 12695の化学商品, (1995)
- 7) 富士通: ANALYST コマンド説明書, V11用, (1986)