

研究課題名：全球多媒体モデルを用いた塩素・臭素系有機汚染物質の動態の評価に関する研究

課題代表者：国立環境研究所環境リスク研究センター 河合 徹
共同研究者：国立環境研究所環境リスク研究センター 鈴木規之

実施年度：平成 24 年度～平成 24 年度

1. 研究目的

残留性有機汚染物質 (POPs) は遠隔地 (例えば極域) の高等生物からも高濃度で検出される等、とりわけ地球規模での生態系への悪影響が懸念されてきた化学汚染物質である。筆者らは、POPs の大気-海洋-陸域-生態圏における動態を複合的に評価する全球多媒体モデル FATE (Finely-Advanced Transboundary Environmental model) の開発を行っている。本課題では、物質の物理化学特性を分子構造より推定する QSPR (quantitative structure-property relationship) モデルを FATE に導入する。これにより、FATE を、理論上可能な全塩素・臭素系物質に拡張する。これらの物質の地球規模動態を評価することを目的とする。

2. 研究計画

物質の物理化学特性を QSPR モデルより推定するサブモデルを開発する。また、本課題に関連するモデルプロセスの改良を行う。その後、物理化学特性からみて代表的な塩素・臭素系有機汚染物質を 20-30 種程度選別してシミュレーションを実施する。この結果を用い、長距離輸送特性 (LRTP; long-range transport potential) と環境中における残留性 (Pov; overall persistency) を評価する。

3. 進捗状況

本モデルでは、各種分配係数 (K_{AW} , K_{OW} , K_{OA} , P_L) と吸着係数 (有機炭素への吸着係数, K_{OC} , 等)、相移動の内部エネルギー、環境媒体中での分解率 (又は半減期) を用いる。これらを QSPR モデルより推定するサブモデルを開発した。また、GDP 等の経済指標と人口分布を取りまとめ、仮想排出量シナリオを作成した。これにより、全塩素・臭素系 POPs (1436 種) のシミュレーションを行うことが可能となった。

本課題と関連し、QSPR モデルより推定した K_{OC} と衛星データ (SeaWiFS) をベースにした炭素循環モデルを用いた、海洋低次生態系への生物移行サブモデルを開発した。これにより、生物ポンプによる POPs の (中) 深海への輸送プロセスが精緻化された。

本計算に先立ち、代表的な塩素系 POPs である PCBs (polychlorinated biphenyls) を取り上げ、過去 80 年間 (1930-210) のシミュレーションを行った。ソース-レセプター解析により LRTP を評価することを試みている。大気・海洋境界層における PCBs の発生源寄与率を推定した。図 1 は海洋混合層内の PCB153 に対する、主要なソース地域 (北アメリカ, ヨーロッパ) の寄与率の空間分布である。北アメリカは北大西洋の中・低緯度、ヨーロッパは極域の PCB153 汚染に対する主要なソース地域になっていることが示された。

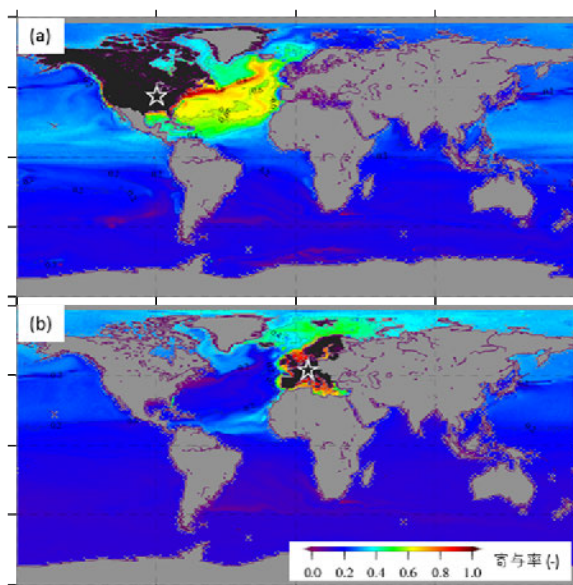


図 1 海洋混合層内の PCB153 への (a) 北アメリカ、(b) 北南西ヨーロッパの寄与率。2010 年の予測結果。☆は排出量の重心。

4. 今後の計画

これまでに (4-9 月)、研究計画前半に記した、モデル開発に関連する作業はほぼ完了した。今後は選別した塩素・臭素系 POPs を対象としたシミュレーションを行い、これらの物質の LRTP と Pov を議論する。

5. 計算機資源の利用状況 (2012 年 4 月～9 月)

実行ユーザ数: 1 CPU 時間 1 ノード未満: 15 hours,
1 ノード: 928 hours, 2 ノード: 0 hour, 計: 943 hours