

# Chemical Mass Balance について

統計数理研究所 柏木宣久

## 1. はじめに

汚染発生源が環境に及ぼす影響の評価は環境管理の重要な問題のひとつである。この問題を解決するため、拡散モデルに基づくシミュレータが広く用いられてきた。シミュレータは、硫黄酸化物や窒素酸化物による大気汚染のように、位置や排出量等の発生源に関する情報を予め特定できる場合には一定の効果がある。しかしながら、現在もなお多くの関心を集めている浮遊粒子状物質 (SPM) やダイオキシン類の場合、発生源が広範囲に散在し、その状況が千差万別のため、発生源に関する情報を予め特定するのは困難であり、そのため、シミュレータは問題解決の有効な手段とはなっていない。シミュレータに代わり問題解決のために利用されているのが、発生源の環境への影響を直接評価しようとする受容体モデルである。受容体モデルは、エアロゾルの分野で発展してきた方法で、多変量解析を基に様々な方法が考案されている (レビューについては、例えば、Henry et al. (1984) や Hopke (1999) を参照)。その内、本報告では、発生源寄与率を推定するための Chemical Mass Balance (CMB) について述べた。

## 2. CMB

CMB の最も単純な方法が指標要素法である。個々の発生源が他の発生源に存在しない独自の物質を排出していれば、環境におけるそれら物質の相対濃度比を計測するだけで個々の発生源の寄与率を推定できる。しかし、SPM やダイオキシン類の場合、そうした都合のよい物質は存在しない。

SPM の発生源と考えられているのが、例えば東京の場合、ディーゼル、土壌、道路粉塵、重油燃料、鉄鋼、海塩、廃棄物焼却等である (鎌滝 他 (1995))。これらの発生源を識別するため、排出される SPM に含まれる元素の組成が用いられている。元素の組成には、ディーゼルで C、土壌、道路粉塵で Sc、鉄鋼で Mn、海塩で Na、廃棄物焼却で K が多い等の特徴がある。しかし、個々の発生源に独自の元素は存在しない。

一方、ダイオキシン類の発生源と考えられているのが、農薬、漂白剤、PCB 製品、廃棄物焼却等である。これらの発生源を識別するため、ダイオキシン類の異性体組成が用いられている。ダイオキシン類には、ポリ塩化ジベンゾパラジオキシン (PCDD)、ポリ塩化ジベンゾフラン (PCDF)、およびコプラナポリ塩化ビフェニル (CoPCB) の 3 種類の有機化合物がある。何れも 2 個のベンゼン環からなる芳香族で、種類の違いはベンゼン環を橋渡しする酸

素原子の数に起因する。これらダイオキシン類には、ベンゼン環に付く塩素原子の数と位置により、多くの同族、異性体が存在する。PCDD で 75 種、PCDF で 135 種、および毒性が認定されている CoPCB で 12 種ある。しかし、個々の発生源に独自の異性体は存在しない。

SPM やダイオキシン類に指標要素法は適用できないが、発生源が既知であれば、発生源と環境における元素あるいは異性体 (以降、まとめて「指標」と呼ぶ) の総質量の間に以下の関係を想定できる。

$$h = \sum_{j=1}^b g_j.$$

ただし、 $h$  は環境における指標の総質量、 $g_j$  は第  $j$  番目の発生源から環境に到達した指標の総質量、そして  $b$  は発生源の数を表す。同様に、第  $i$  番目の指標の質量についても、

$$h_i = \sum_{j=1}^b g_{ij}, \quad i = 1, \dots, a$$

を想定できる。ただし、 $h_i$  は環境における第  $i$  番目の指標の質量、 $g_{ij}$  は第  $j$  番目の発生源から環境に到達した第  $i$  番目の指標の質量、そして  $a$  は指標の数を表す。無論、 $h = \sum_{i=1}^a h_i$ 、 $g_j = \sum_{i=1}^a g_{ij}$  である。上式は、組成比  $\zeta_{ij} = g_{ij}/g_j$  を使えば

$$(1) \quad h_i = \sum_{j=1}^b \zeta_{ij} g_j, \quad i = 1, \dots, a$$

とも書ける。これらの関係を CMB という。ここで更に、組成比  $\eta_i = h_i/h$  および寄与率  $\theta_j = g_j/h$  をモデル (1) に代入すると、

$$(2) \quad \eta_i = \sum_{j=1}^b \zeta_{ij} \theta_j, \quad i = 1, \dots, a$$

が得られる。これは比率に基づく CMB である。モデル (1) と (2) は決定的に同等である。しかし、確率的には必ずしも同等にならない。その詳細および CMB に対する新たな提案については現在準備中の別稿を参照されたい。