

愛知県において排出されている化学物質の関連性 - PRTRデータを用いたネットワーク分析 -

熊谷 禎晃* 川口 豊太 内藤 宏孝

化学物質の環境への排出量に係る推定は、これまで、特定化学物質の排出量の把握等及び管理の改善の促進に係る法律に基づく届出データを用い、物質ごとに届出排出量を集計するなどの対応が行われてきたが、一方で、化学物質どうしの関連性についての情報は十分に把握されてこなかった。そこで本報では、同法の届出データについて、アソシエーション分析の手法を用いて併せて排出される傾向にある化学物質の組合せを求め、その結果をネットワーク図により視覚化した上で、相互の関連性が比較的密になっている物質群(コミュニティ)の抽出を試みた。

その結果、関連して大気へ排出されやすい主なコミュニティとして、アクリル系高分子の原料、金属等の無機物質、石油系燃料・溶剤の構成物質が特定された。また、関連して水域へ排出されやすい主なコミュニティとして、洗剤の原料、染毛剤の原料が特定された。これらの各コミュニティに属する化学物質には構造上の類似性が認められた。

キーワード ネットワーク分析, アソシエーション分析, コミュニティ抽出, 調整残差, 化学物質, PRTR

1 はじめに

1.1 背景及び目的

1999年、化学物質による環境汚染の未然防止に関する関心が急速に高まっている中、人の健康や生態系に有害な性状を有する化学物質について、それによる人体等への悪影響と因果関係の判明の程度に関わらず、事業者による管理活動を改善・強化し環境の保全を図る新たな法制度が必要という認識の下¹⁾、特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律(平成11年法律第86号。以下「法」という。)が制定された。

法に基づき各事業者から提出された対象化学物質の届出データに関しては、事業所ごとの届出内容に加え、物質別に集計された結果についても、国や愛知県を含む各自治体から公表されている^{2,3)}。これら公表資料により、個々の化学物質に関する排出状況については容易に確認できる。

しかしながら、化学物質の環境への排出を包括的に管理・抑制するためには、個々の化学物質がどの媒体にどのくらい排出されるかだけでなく、化学物質がどの化学物質を伴って排出されやすいかなど、その関連性についても把握する必要がある。各事業所からは必ずしも1物質のみではなく複数種の化学物質が排出されるが、個々の化学物質単位で環境への排出量を集計する方法ではその数種類が同一事業所から排出されていたという元

データに存在する関連性の情報は隠れてしまう。化学物質間の排出の関連性に係る情報を集約できれば、関連があるとされた複数物質に共通する用途・業種等を考慮することにより主要な併排出工程について推測ができ、関連する化学物質の必要性や代替可能性についての検討が可能となるなど、効率的かつ効果的に化学物質の管理・排出抑制を促進することが可能となる。また、排出された複数の化学物質が類似の部分構造を有する場合には類似の毒性を有する可能性も考えられるため⁴⁾、複合影響対策の観点からも複数物質の関連性に注目することは重要である。

このため、法に基づく化学物質の届出状況を活用し、アソシエーション分析により環境中に排出される化学物質間の関連性を数値的に求め、それらの関連性が容易に把握できるようネットワーク図として視覚化することを試みた。その上で、得られたネットワーク図を基に、排出の工程及び構造の類似性について考察した。

1.2 略語及び定義

本報において、法第2条第2項に定める第一種指定化学物質を「指定物質」という。また、法第5条に基づき事業者から提出される指定物質の排出量等の届出を「届出」という。

特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律施行令(平成12年政令第138号)を「令」という。また、令別表第1に掲げる指定物質の

* 尾張県民事務所廃棄物対策課

号番号を「物質番号」という。なお、本報は2018年度実績のデータを用いており、当該時点における物質番号は1～462である。

特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律施行規則(平成13年内閣府・財務省・文部科学省・厚生労働省・農林水産省・経済産業省・国土交通省・環境省令第1号)を「規則」という。また、規則第4条第2号イの大気への排出を「大気排出」、川の公共用水域への排出を「水域排出」という。

更に、規則様式第1の別紙において大気排出が0.0である場合に「大気排出なし」、0.0以外である場合に「大気排出あり」という^{*1}。加えて、ある指定物質と別のある指定物質の両指定物質について大気排出があることを「大気併排出^{*2}」という。水域排出についてもこれを準用する。また、規則別表上欄の括弧書きを除く部分を「分類番号」、同欄括弧書き部分を「分類内容」という。

2 方 法

2.1 化学物質の関連性の評価方法

本報では、解析の対象とする化学物質を法の届出対象物質である指定物質とした。我が国で流通している化学物質は工業的に生産されているものだけで数万種に及ぶといわれている⁹⁾。これらすべてについての解析を行うのは現実的ではないことから、人の健康を損なうおそれまたは動植物の生息・生育に支障を及ぼすおそれがある等⁹⁾により環境保全上留意すべきと考えられる「指定物質」を解析の対象とした。

法に基づく届出データ³⁾を概観すると、指定物質の主な排出先は大気と水域であったことから、これらの排出先ごとに排出の関連性を考えることにした。

ある指定物質が排出されているときに別のある指定物質が併せて排出されているという関連性を見出すにあたっては、基本的にアソシエーション分析の手法を用いた。アソシエーション分析とはマーケティング等の分野で実用的に用いられている方法で、POS(Point of Sales: 販売段階)データから「誰が」「どの商品を」

「どのくらい」購入したかのデータを集積し、どの商品とどの商品が併せて購入されているかについての関連

*1 年間推定排出量が0.0kgとして届出されたとき、その意味するところは、 $0 \leq \text{年間推定排出量} < 0.05\text{kg}$ である。しかしながら、解析を行うにあたり便宜的に、年間推定排出量0.0kgと届出された場合には「排出なし」として扱った。

*2 「併排出」は環境分野で一般的に用いられていない。マーケティングの分野において、ある商品と別のある商品について併せて売り上げがある場合に用いられる「併売」から命名した。

(association)を把握するために用いられる。一方、法に基づく届出データは愛知県を含む各自治体により年度毎に公表され、その内容には「どの事業所が」「どの化学物質を」「どのくらい」排出したのかが収録されており、データ構造上、POSデータと類似性がある。このため、化学物質の排出状況についてアソシエーション分析の手法を適用することは可能と考えた。

指定物質間の関連性の強さを判断するにあたっては、指標として調整残差を用いることとした。アソシエーション分析で一般的に用いられている指標には、支持度、確信度、リフトがあり、評価にあたってはそれらを総合的に考慮する必要がある⁷⁾とされるが、どの指標を重要視し、またどの程度の値をとった場合に関連があるとするのか根拠を示すことが難しい。このため、本報では、調整残差によって購入品目どうしの関連性を求める佐藤の方法⁸⁾を用いた。この場合、指標は調整残差の一つのみであり、調整残差は期待度数が十分に大きければ近似的に標準正規分布に従う⁹⁾ことから、統計学で慣習的に用いられる上側5%点(1.96)など判断基準となる数値を決めやすい等のメリットが考えられる。

求めた指定物質間の関連性の指標(調整残差)については、ネットワーク図を用いて視覚的に分かりやすく表現することを試みた。ネットワーク図とは、図1のとおりノード(頂点)で示された要素と要素との間を、何らかの関係でつながっている場合にエッジ(辺)で表現する手法である。ある指定物質と別のある指定物質との2物質の組合せの数は10万通り以上(${}_{462}C_2$)にもなるので、指定物質の組合せ及びその調整残差を網羅的に記述していくのは現実的ではないが、ネットワーク図を用い、指定物質をノードに、調整残差をエッジとすることにより、2枚の図(大気排出、水域排出に対し各1枚)で表現することが可能と考えた。

一般に、現実のネットワークの多くは均質でなく、辺が密な部分や疎な部分があり、辺が密に結びついた部分ネットワークはコミュニティと呼ばれる¹⁰⁾。化学物質の排出に係るネットワークについてもコミュニティが形成されている可能性を念頭に、コミュニティの抽出を行うことにした。

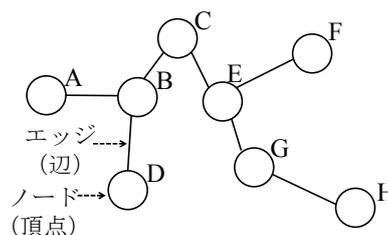


図1 ネットワーク図の例

2.2 データ及び解析環境

愛知県内に事業所を設置する事業者から提出された2018年度実績の届出データを愛知県ウェブページから入手して用いた³⁾。届出データはcsv形式により表1に示す項目等が収納されている。整理番号は事業所に固有の番号であり、業種コードにはPRTR届出の手引き¹¹⁾に定める値が用いられている。1の整理番号が複数行に用いられているときは1の届出に複数の別紙が添付されている(1の事業所で複数の指定物質が取扱いされている)ことを意味している。

データ解析にあたってはR(version 4.0.3)¹²⁾及びRStudio(version 1.2.1335)¹³⁾を用い、加えて、2.3の調整残差の計算にはパッケージsqldf¹⁴⁾を、2.4のネットワーク図の作成にはigraph¹⁵⁾、tidygraph¹⁶⁾、ggraph¹⁷⁾を用いた。

2.3 調整残差の計算

まず、大気排出ありの指定物質について各指定物質間の調整残差を求めた。

はじめに、元データから大気排出なしの行データ(1行は届出別紙1枚に相当する。)を抽出し、削除する。例えば表1のうち整理番号1,3,6の行は削除される。この操作により、大気排出ありの指定物質に係る届出別紙データのみが残る。

次に残った行を用いて各指定物質間の調整残差を求める。届出上、指定物質Xを排出している事業所数 $n_{X\bullet}$ 、指定物質Yを排出している事業所数 $n_{\bullet Y}$ 、指定物質X及びYを両方とも排出している事業所数 n_{XY} を集計する(表2参照)。この n_{XY} に対する期待度数 $\hat{\mu}_{XY}$ は次式で表される。

$$\hat{\mu}_{XY} = n_{X\bullet} \cdot n_{\bullet Y} / N \quad (1)$$

ここで N はいずれかの指定物質について大気排出がある事業所の総数(以下「大気排出事業所数」という。)である。また、各セルの調整残差 d は次式により求まる。

$$d_{XY} = \frac{n_{XY} - \hat{\mu}_{XY}}{\sqrt{\hat{\mu}_{XY} \left(1 - \frac{n_{X\bullet}}{N}\right) \left(1 - \frac{n_{\bullet Y}}{N}\right)}} \quad (2)$$

具体例として、物質Xをニッケル化合物(309)(物質名の後のカッコ内数字は物質番号とする。以下同様。)、物質Yをマンガン及びその化合物(412)とする場合の大気併排出に係る計算を示す。ニッケル化合物(309)の事業所数は9、マンガン及びその化合物(412)の事業所は22、ニッケル化合物とマンガン及びその化合物の併排出届出数は7、大気排出事業所数は1,481であった(表3参照)。すなわち $n_{X\bullet} = 9$ 、 $n_{\bullet Y} = 22$ 、 $n_{XY} = 7$ 、 $N = 1,481$ であり、式(1)(2)に代入することにより、期待値と調整残差

表1 データ格納形式のイメージ

整理番号 ^{注1)}	業種コード ^{注2)}	番号 ^{注2)}	大気排出量 ^{注2)}	水域排出量 ^{注2)}				
1	...	1600	...	243	...	0	0	...
2	...	1200	...	243	...	0.00022	0	...
3	...	2000	...	129	...	0	0	...
4	...	2100	...	438	...	39	0	...
5	...	3000	...	384	...	1200	0	...
6	...	3100	...	304	...	0	0.7	...
6	...	3100	...	305	...	0	0.9	...
6	...	3100	...	309	...	0	13	...
6	...	3100	...	405	...	0	33	...
:	:	:	:	:	:	:	:	:

注1) 実際にはハイフンで区切られた15桁の整理番号が年度毎に割り当てられる。
注2) 実際の列名称は長いので、ここでは略語・略称を用いた。

表2 2物質のクロス集計表

		指定物質 Y		
		排出あり	排出なし	合計
指定物質 X	排出あり	n_{XY}	$n_{X\bar{Y}}$	$n_{X\bullet}$
	排出なし	$n_{\bar{X}Y}$	$n_{\bar{X}\bar{Y}}$	$n_{\bar{X}\bullet}$
合計		$n_{\bullet Y}$	$n_{\bullet \bar{Y}}$	N

表3 2物質のクロス集計表(実例)

		マンガン及びその化合物(412)		
		排出あり	排出なし	合計
ニッケル化合物(309)	排出あり	7	2	9
	排出なし	15	1,457	1,472
合計		22	1,459	1,481

表4 多物質の集計表(省略あり)

		指定物質 Y							
		1	2	3	...	412	...	462	排出事業所数
指定物質 X	1	0	0	0	...	0	...	0	6
	2	0	0	0	...	0	...	0	0
	3	0	0	0	...	0	...	0	7
	:			
	309	0	0	0	...	7	...	1	9
	:			
	462	0	0	0	...	1	...	1	1
排出事業所数		6	0	7	...	22	...	1	1,481

表5 2物質間の調整残差に係る計算結果のイメージ

指定物質X 物質番号	指定物質Y 物質番号	指定物質XY 調整残差(併排出)
1	2	NA ^{注)}
1	3	NA
:	:	:
309	412	18.58
:	:	:
461	462	NA

注) 併排出がない場合、計算ができないためNA(Not Available)と表す。

はそれぞれ $\hat{\mu}_{XY} = 0.139$ 、 $d_{XY} = 18.98$ として求まる。

全指定物質に係る集計を一括して表すと表4のようになり、上記と同様の計算により、表5のようにすべての指定物質の組合せ^{*3)}について調整残差 d_{XY} を求めることができる。

*3) 併排出がない指定物質の組合せについては計算できない。

水域排出ありの指定物質についても、大気排出ありと同様の方法に計算した。

以上に係る計算は、佐藤の方法⁸⁾を基にRのプログラムを実装することにより行った。

2.4 ネットワーク図の作成

2.3で求めた各調整残差(複数の2物質間の関連性)を一見して理解できるようにネットワーク図を作成することにした。ノードには指定物質を置き、2つの指定物質の併排出に係る調整残差が標準正規分布の上側5%点に相当する1.96を超える場合にノード間にエッジを描くこととした。ただし、関連性の一般化を目指す目的に鑑み、2つの指定物質を併排出する事業所の数が極端に少ない場合(併排出事業所数が1又は2の場合)については調整残差の値に関わらずエッジとして表さないこととした。

コミュニティの抽出にあたっては、焼きなまし法¹⁸⁾(spinglass.community)を用いた。コミュニティ検出の多くの手法について計算時間と検出精度の視点から比較しているFortunatoの論文¹⁹⁾及び竹本の解説²⁰⁾において、同方法は適切にモジュールを見つけることに秀でていとされているためである。

求めた各コミュニティについて、igraphのtransitivity()を用いてクラスター係数(コミュニティに含まれる各ノードのクラスター係数の平均値)²¹⁾を求めた。クラスター係数は0から1までの値をとり、直感的には値が大きいほど各ノードは密にエッジで結合されており、すなわちコミュニティに含まれる複数物質のうち多くの種類の物質が関連して排出されると考えられる。

ネットワーク図の作成にあたり、プログラムの実装においてはKitano²²⁾の方法を基にした。

計算や結果の解釈にあたっては適宜「ネットワーク分析 第2版」を参考にした²¹⁾。

最後に、ネットワーク図を基に、排出業種データも加味した上で排出工程の推測を行い、また、コミュニティを構成するノードの構造上の類似性について考察した。

3 結果と考察

3.1 届出の概要

本県における2018年度実績の届出事業所数は表6に示すとおり1,933件あり、届出物質数はのべ13,021物質であった。このうち、大気排出ありの指定物質数(b)はのべ6,697物質で、水域排出ありの指定物質数(b)はのべ1,723物質であった。

表6 愛知県における届出の概要(2018年度実績)

排出先	事業所数 (a)	指定物質数 ^{注)} (b)	b/a
届出事業所	1,933	13,021	6.7
うち大気排出あり	1,481	6,697	4.5
うち水域排出あり	277	1,723	6.2

注) 各事業所から排出される指定物質数の総和。表7及び表8に同じ。

表7 業種別の届出の概要(大気排出あり)

業種 ^{注)}	業種 コード	事業所数 (a)	指定物質数 (b)	b/a
燃料小売業	5930	687	4,516	6.6
化学工業	2000	88	454	5.2
鉄鋼業	2600	20	71	3.6
輸送用機械器具製造業	3100	152	486	3.2
窯業・土石製品製造業	2500	33	85	2.6
電気機械器具製造業	3000	39	100	2.6
石油製品・石炭製品製造業	2100	23	56	2.4
金属製品製造業	2800	94	227	2.4
プラスチック製品製造業	2200	59	140	2.4
一般機械器具製造業	2900	47	107	2.3
非鉄金属製造業	2700	28	48	1.7
パルプ・紙・紙加工品製造業	1800	15	21	1.4
産業廃棄物処分量	8722	20	27	1.4
一般廃棄物処理業	8716	33	35	1.1

注) 大気排出事業所数1,481に対し1%以上を占める業種(a≥15)を掲載

表8 業種別の届出の概要(水域排出あり)

業種 ^{注)}	業種 コード	事業所数 (a)	指定物質数 (b)	b/a
産業廃棄物処分量	8722	17	195	11.5
一般廃棄物処理業	8716	61	632	10.4
下水道業	3830	55	507	9.2
化学工業	2000	23	121	5.3
プラスチック製品製造業	2200	3	10	3.3
鉄鋼業	2600	11	35	3.2
輸送用機械器具製造業	3100	36	87	2.4
金属製品製造業	2800	29	63	2.2
窯業・土石製品製造業	2500	13	24	1.8
パルプ・紙・紙製品製造業	1800	7	12	1.7
電気機械器具製造業	3000	4	6	1.5
繊維工業	1400	4	5	1.3

注) 水域排出事業所数277に対し1%以上を占める業種(a≥3)を掲載

大気排出のあった指定物質について、業種別の届出概要を表7に示す。指定物質数(b)が多いのは燃料小売業、輸送用機械器具製造業、化学工業などの業種であり、また、1事業所あたり排出される指定物質の数(b/a)は、燃料小売業、化学工業、鉄鋼業などの業種で多い。

水域排出のあった指定物質について、業種別の届出概要を表8に示す。指定物質数(b)が多いのは一般廃棄物処理業、下水道業、産業廃棄物処分量などの業種であり、これらの業種では、1事業所あたり排出される指定物質の数(b/a)についても多い。

3.2 大気排出があった指定物質に係る関連

大気への排出に係る関連について、ネットワーク図を図2に示した。また、参考として、各コミュニティのクラスター係数を表9に示した。

最初に、凡例等について説明する。ノードは指定物質

を示し、ノードの右上にその物質番号を黒字で添えた。また、構造上の類似性を見るための参考として、ノードの中に白抜き文字で分類番号を表した。ノードの色は、コミュニティを識別できるように塗分けしており、便宜的に#1~#7のコミュニティ番号を付与している。更に、参考情報として、ノードの大きさにより指定物質の排出量を示した。エッジの色は調整残差を表し、色の赤みが強いほど調整残差の値が大きいことを示す。参考情報として、エッジの太さで届出数を表し、線が太いほど届出数が多いことを示す。

以下、得られたネットワーク図について、コミュニティごとに考察する。

まず、コミュニティ番号#1に含まれている物質について考える。#1に含まれているのは、アクリル酸やその誘導体(3,4,7,8), アクリロニトリル(9), スチレン(240), メタクリル酸やその誘導体(415,417,419,420)である。クラスター係数は0.89と大きく、すなわちノード数に対してエッジの数は多く、コミュニティ内の多くのノードが密に繋がっている様子が見られる。このことから、#1の多物質に共通するような排出工程の存在が考えられた。用途について、これらの物質が主に化学工業に属する事業所から排出されていることも考慮すると、アクリル系高分子またはそのスチレン共重合体の原料として使用され、生産工程において関連して排出されていると考えられる^{23,24}。構造的にはスチレンを除きいずれも第4分類に属しており、カルボン酸系又はその誘導体の構造を有する不飽和の脂肪族炭化水素を基本骨格としている。アクリル酸をメチル基で置換したものがメタクリル酸であり、アクリル酸のカルボキシル基をシアノ基に置き換えたものがアクリロニトリルであることから、これらは構造的に類似している。

#2はクロム及び3価クロム化合物(87)、コバルト及びその化合物(132)、鉛化合物(305)、ニッケル(308)、ニッケル化合物(309)、ふっ化水素及びその水溶性塩(374)、ほう素化合物(405)、マンガン及びその化合物(412)、モリブデン及びその化合物(453)から構成されている。クラスター係数は0.81であり比較的大きいことから、コミュニティ内の多物質に共通するような排出プロセスの存在が考えられた。各物質は、主に、輸送用機械器具製造業、鉄鋼業、窯業・土石製品製造業、金属製品製造業から排出されている。このことから排出工程について考えると、輸送用機械器具製造業からは車体等の材料として用いられている金属類が溶接等の際²⁵に排出されていることが想像される。鉄鋼業では希少金属等が特殊鋼の製造原料として用いられ²⁶、またCaF₂が融剤として用

いられる²⁷ことから、これらが製品製造時に排出されると考えられる。窯業・土石製品製造業において、金属類は釉薬としての使用が²⁸、ほう素は陶磁器用釉薬の融点を下げるための使用が²⁹考えられ、これらが、焼き付け時に排出されることが推測される。金属製品製造業からは、合金の圧延や熱処理の過程において排出されると考えられる。構造上は、いずれも第1分類に属する無機系の化学物質であるという点がコミュニティ全体に共通している。

#3はクレゾール(86)、フェノール(349)である。これらの排出工程については、隣接するホルムアルデヒド(411)とともにフェノール系樹脂の原料³⁰として使用され、生産工程において関連して排出されていると考えられる。構造的には、両物質ともに第8分類のアルコールの構造を有する単環式芳香族化合物である。フェノール(349)にメチル置換基が付いているものがクレゾール(86)であり、構造上の類似性が高い。

#4はエチルベンゼン(53)、キシレン(80)、クメン(83)、1,2,4-トリメチルベンゼン(296)、1,3,5-トリメチルベンゼン(297)、トルエン(300)、ヘキサメチレン=ジイソシアネート(391)、*n*-ヘキサン(392)、ベンゼン(400)の計9物質から構成され、調整残差はとりわけ大きく、届出数も際立って多い。クラスター係数は0.90と大きいことから、コミュニティ内の多物質に共通するような排出工程の存在が考えられた。属する物質のほとんどは石油由来の化学物質であり、排出量も多い。エチルベンゼン(53)、キシレン(80)、1,2,4-トリメチルベンゼン(296)、1,3,5-トリメチルベンゼン(297)、トルエン(300)、*n*-ヘキサン(392)、ベンゼン(400)の7物質について、主な届出業種は燃料小売業であることから、燃料用ガソリンの保管や補充の際の併排出が考えられる。1,3,5-トリメチルベンゼン(297)については、業界団体又は会員企業の実測調査を基に定められた給油所における排出係数に関して、他の6物質よりも小さな値(又は係数なし)であることから³¹、0.0kg/年として届出している事業所(当該物質について大気排出なしの事業所)が複数あると考えられた(附表4-1参照)。排出量に注目すると、エチルベンゼン(53)、キシレン(80)、1,2,4-トリメチルベンゼン(296)、トルエン(300)については、溶剤として工業用ガソリンを用いる輸送用機械器具製造業の寄与が大きい³¹。実際、これら4物質は併せて届出られており、一方で、1,3,5-トリメチルベンゼン(297)、*n*-ヘキサン(392)、ベンゼン(400)の併排出届出数は若干小さくなっている(附表4-2参照)。この理由として、1,3,5-トリメチルベンゼン(297)は先の燃料用ガソリンと同様に排出係数が小さくなると考えられ、*n*-

ヘキサン(392)やベンゼン(400)は沸点が低く乾燥ブースにおける燃焼法等のVOC対策により除去されやすい可能性が考えられる。クメン(83)及びヘキサメチレン=ジイソシアネート(391)は主に化学工業から排出されている。ただし、これら2物質はそれほど多くの化学工業事業所で用いられている訳ではなく、併排出届出数が少ない(附表4-3参照)。クメン(83)はウレタンの原料である酸化プロピレンの原料³²⁾として、ヘキサメチレン=ジイソシアネート(391)はポリウレタン樹脂を製造する際の硬化剤³³⁾として使用されることから、ポリウレタン生成反応の触媒である#6のトリエチルアミン(277)³⁴⁾等を伴って、併せて排出されると推測される。構造的には、ヘキサメチレン=ジイソシアネート(391)と*n*-ヘキサン(392)を除いた7物質は第6分類の単環式芳香族化合物であり、基本骨格が共通している。

#5はアセトニトリル(13)、ジクロロメタン(186)、N,N-ジメチルアセトアミド(213)、N,N-ジメチルホルムアミド(232)、トリクロロエチレン(281)、トリレンジイソシアネート(298)、1-ブロモプロパン(384)から構成されている。クラスター係数は0であり、エッジが三角形になっている箇所がないことから、エッジで結ばれた2物質間には併排出の関係性があるものの、コミュニティ全体に共通するような排出プロセスはないものと考えられた。ジクロロメタン(186)を中心に考えると、アセトニトリル(13)、N,N-ジメチルホルムアミド(232)、トリクロロエチレン(281)、1-ブロモプロパン(384)が連結されている。これらは主に金属製品製造業や化学工業から排出されていることから、前者においては洗浄剤として、後者においては溶媒として、使用・排出されていると考えられる³⁵⁻³⁹⁾。また、ジクロロメタン(186)はウレタンフォームの原料であるトリレンジイソシアネート(298)⁴⁰⁾とも繋がっており、この組み合わせにおいては発泡剤³⁵⁾としての使用が考えられる。N,N-ジメチルアセトアミド(213)とN,N-ジメチルホルムアミド(232)は、汎用溶媒では溶解しないセルロース等を溶解させるときに用いられることから、これらが合わせて、あるいは使い分けて使用されていると考えられる⁴¹⁾。#5を構成する指定物質の構造について、多くは第2分類又は第4分類に属しており、比較的分子量が小さい極性の鎖状炭化水素である。

#6に含まれる指定物質は、エチレングリコールモノエチルエーテル(57)、酢酸2-エトキシエチル(133)、酢酸ビニル(134)、ダイオキシシン類(243)、トリエチルアミン(277)、ナフタレン(302)、ホルムアルデヒド(411)、メチルナフタレン(438)である。クラスター係数は0.81であり

比較的大きいものの、コミュニティ内の多物質に共通するような排出工程が考えられない。このため、異なる複数の少数物質による関連が存在していると仮定し、一部のエッジについて次のとおり考察した。ナフタレン(302)、ホルムアルデヒド(411)について、主な届出業種が化学工業や輸送用機械器具製造業であることを踏まえると、前者業種よりはナフタレン-ホルマリン縮合物⁴²⁾の生産工程における両物質の排出が、後者業種からは工業用溶剤⁴³⁾の成分としてのナフタレン(302)の揮発と塗装焼き付け時におけるホルムアルデヒド(411)の副生・排出が起こっていると考えられる。エチレングリコールモノエチルエーテル(57)と酢酸2-エトキシエチル(133)は、両物質とも塗料等に対する溶剤として使用され^{44,45)}、関連して排出されているものと考えられる。#6に含まれる物質は、構造上も、全体に通じる共通点が見出せない。

#7に含まれる、エチレンオキシド(56)と1,2-エポキシプロパン(68)は、用途の点では共にウレタンフォームの前駆体であるポリエーテルの原料として用いられていることから⁴⁶⁾、製品の生産工程において関連して排出されていると考えられる。業種データを見ても、両物質を共に排出しているのは化学工業に属する事業所である。構造的には、第3分類に帰属するエポキシ基を有する鎖状炭化水素化合物である。エチレンオキシド(56)にメチル基を付与したものが1,2-エポキシプロパン(68)であるので、類似性は高い。

3.3 水域排出があった指定物質に係る関連

公共用水域へ排出されている化学物質の関連についてのネットワーク図を図3に示した。また、参考として、各コミュニティのクラスター係数を表10に示した。

コミュニティ番号には、大気排出のそれと区別するため、便宜的に下線を付し#1のように表記する。

以下コミュニティごとに含まれている指定物質の関連性について論じる。

#1は鉛(304)、鉛化合物(305)、ニッケル化合物(309)、モリブデン及びその化合物(453)から構成される。クラスター係数は0であり、これら4物質に共通する排出工程はないと考えられた。ニッケル化合物(309)は鉄鋼業、金属製品製造業、輸送用機械器具製造業を始め多くの業種から排出されており、特殊鋼製造時や表面処理時における排出^{47,25)}が考えられる。鉛(304)を排出している事業所はいずれも輸送用機械器具製造業に属しており、はんだめつき等における使用・排出が考えられる⁴⁸⁾。モリブデン及びその化合物(453)を排出している事業所はいず

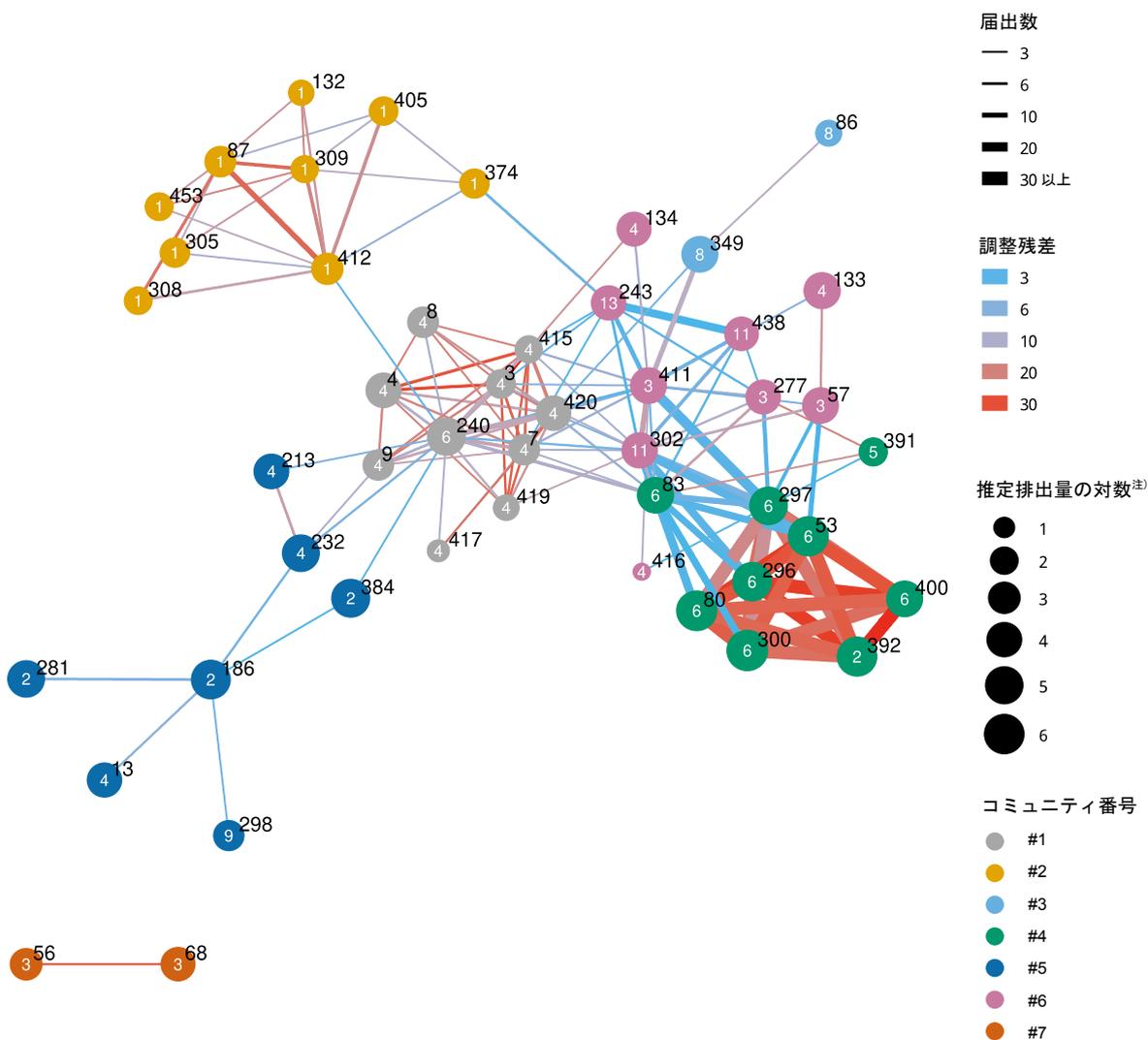


図2 大気併排出に係るネットワーク

図注) 単位は kg/年(ダイオキシン類は mg-TEQ/年)であり, その対数をとった. 図3についても同様とする.

表9 コミュニティのクラスター係数

コミュニティ	#1	#2	#3	#4	#5	#6	#7	(全体)
クラスター係数	0.89	0.81	NaN	0.90	0.00	0.81	NaN	(0.70)

表注1) 頂点 v_i が k_i 個の頂点と隣接するとき, v_i を含む三角形の数の理論的な最大値は $k_i(k_i - 1)/2$ であり, 頂点 v_i のクラスター係数 C_i は次のように定義される.

$$C_i = \frac{v_i \text{を含む三角形の数}}{k_i(k_i - 1)/2}$$

グラフ全体のクラスター係数 C はグラフに含まれる n 個の頂点のクラスター係数の平均値として定義される.

$$C = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n C_i$$

以上の定義については文献21参照. C_i 値については附表1参照.

コミュニティのクラスター係数については, グラフ全体のクラスター係数を求める方法を準用し, コミュニティに含まれる頂点のクラスター係数の平均値とした. 表10についても同様とする.

表注2) 頂点数が2以下のコミュニティについては計算不可能であるため NaN(Not a Number)と表す.

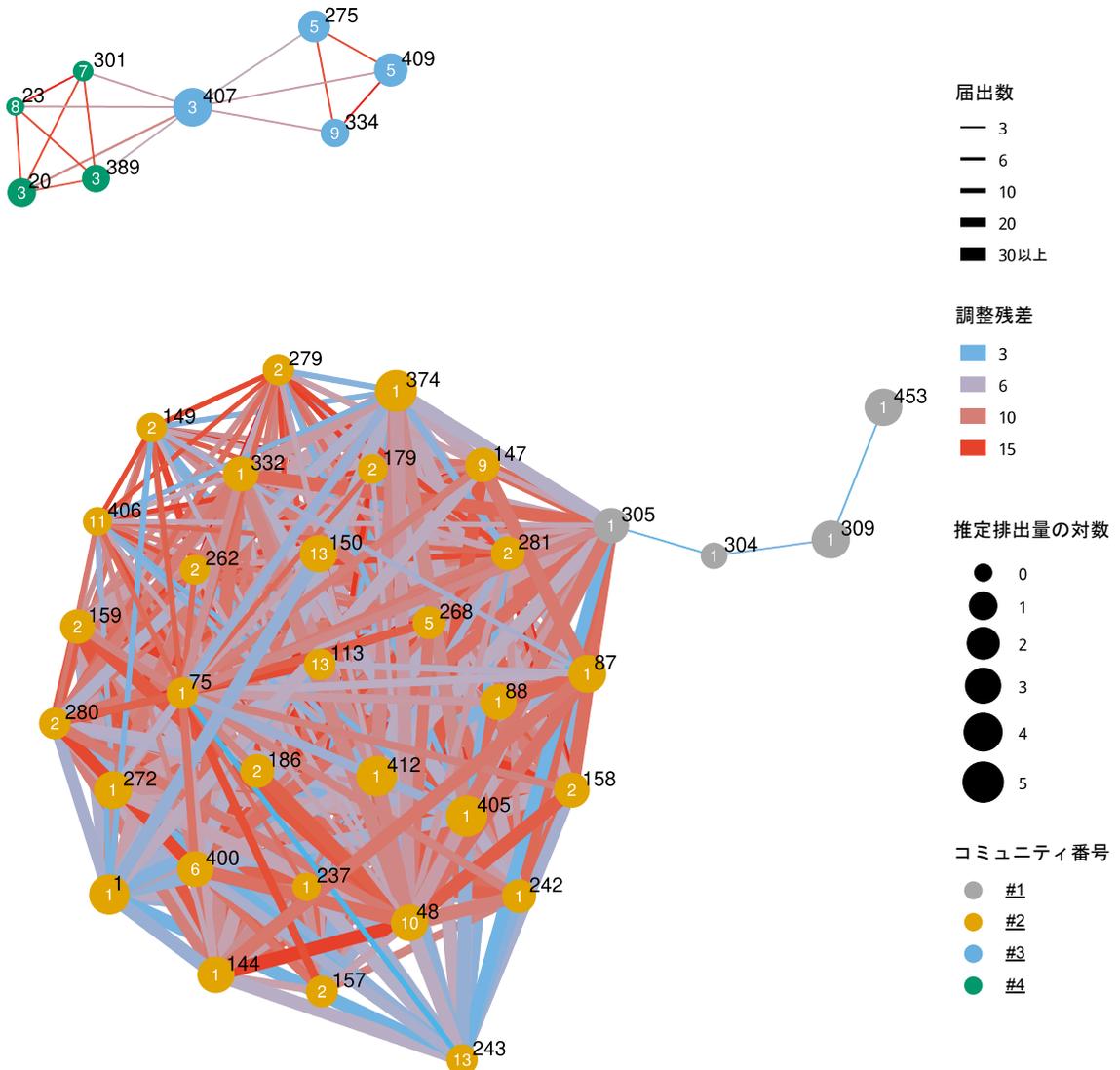


図3 水域併排出に係るネットワーク

表10 コミュニティのクラスター係数

コミュニティ	#1	#2	#3	#4	(全体)
クラスター係数	0.00	0.99	1.00	1.00	(0.93)

れも鉄鋼業に属しており、特殊鋼製造時⁴⁹⁾の排出が考えられる。以上から、ニッケル化合物(309)と鉛(304)はともに輸送用機械器具製造業から排出されるが、使用される工程は異なっており、必ずしも同時に排出されるものではないと考えられる。一方、ニッケル化合物(309)とモリブデン及びその化合物(453)は特殊鋼製造工程において併せて使用・排出される可能性が考えられる。構造的にはすべての指定物質が第1分類に属する金属系の化学物質である。

#2を構成する30物質は特別要件施設*4に係る対象物質で、水質汚濁防止法及び廃棄物の処理及び清掃に関する法律で規制されている30物質のうち29物質*5とダイオキシン類対策特別措置法で規制されているダイオキシン類である。この30物質については、主に届出事業所数・届出指定物質数が共に多い業種である下水道業及び一般廃棄物処理業の事業者から報告され、それがネットワーク図上に明瞭に表現されており、それがクラスター係数の大きさ(0.99)にも反映されている。なお、法制度上の仕組みを反映しているだけでなく、実質的にもこれらの業種は多岐に及ぶ化学物質を受け入れ、処理していると考えられる。#2を構成する化学物質に構造上の共通性は見られない。

#3はドデシル硫酸ナトリウム(275)、4-ヒドロキシ安息香酸メチル(334)、ポリ(オキシエチレン)=アルキルエーテル(407)、ポリ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル硫酸エステルナトリウム(409)で構成されている。クラスター係数は1であり、これら4物質は相互に関連している。用途について、ポリ(オキシエチレン)=アルキルエーテル(407)は、家庭用、工業用ともに最も多く使用されている非イオン界面活性剤である⁵⁰⁾。ドデシル硫酸ナトリウム(275)やポリ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル硫酸エステルナトリウム(409)は洗剤の基材として^{51,52)}、また、4-ヒドロキシ安息香酸メチル(334)は化粧品・医薬の防カビ剤として用いられる⁵³⁾ことから洗剤の補助剤として添加される。以上より、これら4物質は洗剤の製造工程で関連して排出されていると考えられる。#3に含まれる指定物質は分類上の共通性はないが、長鎖化合物が多いことが特徴として挙げられる。

#4は2-アミノエタノール(20)、*p*-アミノフェノール(23)、トルエンジアミン(301)、ヘキサデシルトリメチルアンモニウム=クロリド(389)から構成されている。クラスター係数は1であり、これら4物質は相互に関連している。2-アミノエタノール(20)は染毛剤のpH調整剤⁵⁴⁾、*p*-アミ

ノフェノール(23)及びトルエンジアミン(301)は染毛の際の酸化染料中間体⁵⁵⁾、ヘキサデシルトリメチルアンモニウム=クロリド(389)はリンス等に用いられている⁵⁶⁾ことから、染毛剤の製造工程において関連して排出されていると考えられる。#4には分類上の共通性はないが、アンモニウム骨格を有するという共通性がある。

4 まとめ及び今後の課題

4.1 まとめ

届出データについてアソシエーション分析の手法を用いて解析し、関連して排出されている指定物質をネットワーク図により示すことができた。

排出に係る関連は2物質間にとどまらず、複数の指定物質で構成されるコミュニティが特定された。以下のとおり、各コミュニティに属する指定物質の関連からその排出工程について一定の解釈ができた。また、一部のコミュニティにおいてはそれに属する指定物質に関して構造上の類似性が確認された。

大気排出について、#1はクラスター係数が大きくコミュニティ内の多物質に共通するような排出工程の存在が考えられた。用途においてアクリル系高分子の原料であるという共通性があり、生産工程において併せて排出されていると考えられた。構造的にも、アクリル酸・メタクリル酸の骨格を母体としており、類似性が高かった。

#2はクラスター係数が比較的大きく、コミュニティ内の多物質に共通する排出工程の存在が考えられた。用途は業種ごとに異なり、主に合金の原料・添加剤や窯業の釉薬としての使用・排出工程が考えられた。構造的には無機系の物質であるという共通性が見られた。

#3は2物質のみから構成され、フェノール樹脂原料として使用されると考えられた。構造的にもフェノールを基本骨格とした類似性の高い組合せであった。

#4はクラスター係数が大きく、コミュニティ内の多物質に共通する排出工程の存在が考えられた。#4を構成する指定物質は主に石油由来であり、燃料用ガソリンや工業用ガソリンとして保管、使用される際に併せて排出されていると考えられた。#4を構成する指定物質間の調整残差はとりわけ大きく、届出数も際立って多かった。このことは、燃料小売業に係る届出事業所数や排出されるのべ指定物質数が他の業種と比較して極めて多いことによると考えられた(表7参照)。石油由来物質は届出数だけでなく排出量も多く、主要な量的排出元は輸送用機械器具製造業などであった。構造的には、多くは単環式芳香族化合物であり、類似していた。

*4 取扱量に関わらず届出が必要とされる施設のことをいう。

*5 残り1物質は#1の鉛化合物(305)である。

#5は、用途において、主に洗剤・溶媒として使用・排出されると考えられた。分子構造においては、比較的分子量の小さい極性の鎖状炭化水素という共通点があった。

#6については、クラスター係数は比較的大きかったものの、多物質間における用途上の共通項を見出すことが難しく、少数の物質を併排出する複数の排出工程の組合せにより構成されていると考えられた。構造についても、全体に共通する特徴は見られなかった。

#7は2物質のみから構成され、用途においてウレタンフォームなどの原料として用いられるという共通性があり、生産工程において関連して排出されていると考えられた。この2物質はエポキシ基を有する類似物質であり、置換基の有無の違いがあるだけであった。

水域排出について、#1に関し、クラスター係数は0であり、2物質の併排出の組み合わせが考えられた。排出工程は特殊鋼又はめっきに起因するものと考えられた。#1に属する物質はいずれも金属である。

#2はクラスター係数が大きかったものの、含まれている指定物質は特別要件施設に係る対象物質であり、下水道業や廃棄物処理業においてこれらの排出について把握・報告されていることが反映されているものと考えられた。構造上の類似性はない。

#3はクラスター係数が1であり、用途においても洗剤の原料であるという共通性があり、製造工程において併せて排出されていると考えられた。構造上、長鎖化合物が多いことが特徴である。

#4はクラスター係数が1であり、用途においても頭髪用化粧品の原料であるという共通性があり、製造工程において併せて排出されていると考えられた。構造上はアンモニウム骨格を有するという特徴がある。

4.2 今後の課題

第1には、解析の対象とする化学物質のアップデートである。令和2年8月、中央環境審議会から有害性とばく露の観点から指定物質を見直すことが答申され⁵⁷⁾、これを受け令和3年10月20日に政令が改正された(施行期日は令和5年4月1日)ことから、新政令の515指定物質により改めて解析を行う必要がある。

第2には、ノード・エッジ情報の充実である。とりわけ移動量を考慮した水域排出情報の充実が必要と考えている。下水道業や廃棄物処理業において、31指定物質に係る排出状況が確実に把握されている一方で、自ら意図して化学物質を取り扱っている訳ではないため、31指定物質以外の指定物質についての排出状況は必ずし

も十分に把握されていない可能性が考えられる。従って、流入量(他事業所からの移動量)が多く分解性の低い指定物質(31物質以外)について何らかの方法で排出があるかを判定し、排出物質に組み入れる検討が必要と考える。

第3には、実サンプルの分析結果とネットワーク図の比較による、ネットワーク図の適用範囲の把握である。法に基づく届出は事業所からの推定排出量についてなされるものであることから、ネットワーク図において見られる関連性は、基本的に事業所の至近(ばい煙や排水の排出口やその付近)で採取されたサンプルにおいて観測されると考えられる。しかしながら、無機系の物質や難分解性の化合物については、排出された時と同様の関連性が、発生源から空間的に離れた場所であっても観測される可能性があるとの仮説が立てられる。本報で作成したネットワーク図が、どのような場所で採取された実サンプルと相性が良いのかについては、環境試料を用いた多物質の同時分析により確認する方法が考えられる。

第4には、排出業種において蓄積されている技術的知見の収集によるエッジの解釈性の向上である。各工程で汎用的に使用・排出される化学物質の組合せは、それぞれの専門領域においておそらく既に知見があり、本報は調整残差やコミュニティを手がかりにそれを再発見・可視化したに過ぎないという側面がある。事業所や業界団体へのヒアリング等により知見を集積した上でネットワーク分析の解釈を進めれば、物質間の関連性について一層正確な解釈が可能になると考えられる。

第5には、構造情報の詳細化である。類似の部分構造を有する化学物質は類似の生物学的作用を起しやすく、そのような関係性は構造活性相関と呼ばれている。また、脂質に富む細胞膜を透過して生体内の標的部位まで輸送されやすいかどうかのパラメータとしてlog Pow(オクタノール/水分配係数の常用対数)が用いられる⁴⁾。本報では規則に基づく13分類を構造情報として用いたが、上述のような毒性に係る知見を得ることも念頭に、官能基などの部分構造やlog Powの情報を付与することも有用と考えられる。

文 献

- 1) 環境庁企画調整局環境保健部:「特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律案」について(平成11年3月16日付け報道発表資料), <http://www.env.go.jp/press/2084-print.html> (2022.2.8)

- 2) 環境省: 集計結果の概要(PRTRインフォメーション広場), <http://www.env.go.jp/chemi/prtr/result/gaiyo.html> (2022.2.8)
- 3) 愛知県環境局環境活動推進課: 愛知県内の届出排出量等のデータ, https://www.pref.aichi.jp/kankyo/katsudo-ka/jigyoprtr/01jigyousya/kekka/todokede_data.html (2022.2.8)
- 4) 独立行政法人国立環境研究所: 環境儀 化学物質の形から毒性を予測する 計算化学によるアプローチ Interview 研究者に聞く, **47**, 4-9 (2013)
- 5) 環境省環境保健部環境リスク評価室: 化学物質の環境リスク評価, **17**, (2019), <https://www.env.go.jp/chemi/report/ierac17/index.html> (2022.2.8)
- 6) 特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律(平成11年法律第86号) 第2条第2項
- 7) 金 明哲: アソシエーション分析(1), https://www1.doshisha.ac.jp/~mjn/R/Chap_40/40.html (2022.2.8)
- 8) 佐藤満紀: 実践で学ぶネットワーク分析, <https://www.slideshare.net/MitsunoriSato/tokyor32-network-analysis-24442516> (2022.2.8)
- 9) 太郎丸 博: 人文・社会科学のためのカテゴリカル・データ解析入門, ナカニシヤ出版, **40** (2005)
- 10) 村田剛志: ネットワークからのコミュニティ抽出, 知能と情報, **21** (4), 500-508 (2009)
- 11) 経済産業省, 環境省: PRTR届出の手引き(2020年1月), https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/law/prtr/tebiki2.html (2022.2.8)
- 12) R Core Team: R: A language and environment for statistical computing, <http://www.r-project.org> (2022.2.8)
- 13) RStudio Inc.: RStudio, <http://www.rstudio.com/> (2022.2.8)
- 14) G. Grothendieck: sqldf: Manipulate R Data Frames Using SQL, <https://cran.r-project.org/web/packages/sqldf/index.html> (2022.2.8)
- 15) Csardi G, Nepusz T: The igraph software package for complex network research, <https://igraph.org/> (2022.2.8)
- 16) Thomas Lin Pedersen: tidygraph: A Tidy API for Graph Manipulation, <https://cran.r-project.org/web/packages/tidygraph.html> (2022.2.8)
- 17) Thomas Lin Pedersen: ggraph: An Implementation of Grammar of Graphics for Graphs and Networks, <https://cran.r-project.org/web/packages/ggraph/index.html> (2022.2.8)
- 18) Jörg Reichardt, Stefan Bornholdt: Statistical mechanics of community detection, *Physical Review E*, **74** 016110 (2006)
- 19) Santo Fortunato: Community detection in graphs, *Physics Reports* **486**, 75-174 (2010) <https://arxiv.org/abs/0906.0612v2> (2022.2.8)
- 20) 竹本和広: R+igraph, <https://sites.google.com/view/takemotolab/r-igraph> (2022.2.8)
- 21) 金 明哲 編, 鈴木 努 著: ネットワーク分析第2版 R で学ぶデータサイエンス 8 巻, 共立出版, 265 (2017)
- 22) Takashi Kitano: {tidygraph}と{ggraph}によるモダンなネットワーク分析, <https://www.slideshare.net/kashitan/tidygraphggraph> (2022.2.8)
- 23) 高坂泰弘: 変貌自在なアクリル樹脂, 化学と教育, **65** (5), 236-237(2017)
- 24) 上垣外正己, 佐藤浩太郎: ラジカル重合, ネットワークポリマー, **30** (5), 234-249 (2009)
- 25) 愛知労働局労働基準部健康課: 「溶接ヒューム」及び「塩基性酸化マンガン」が特定化学物質(第2類物質)になりました, (令和2年4月22日公布・告示 / 令和3年4月1日施行), <https://www.aichis.johas.go.jp/media/2020/06/0b0a46e9edac14c16917a27e0ce8b60d.pdf> (2022.2.8)
- 26) 潮田浩作, 吉村仁秀, 海藤宏志, 木村 謙: 鉄鋼材料における合金元素の活用の変遷と将来展望, 鉄と鋼, **100** (6), 2-13 (2014)
- 27) 独立行政法人石油天然ガス・金属鉱物資源機構: 鉱物資源マテリアルフロー2013 フッ素(F), **1** (2014), https://mric.jogmec.go.jp/wp-content/old/uploads/reports/report/2014-06/28.20140601_F.pdf (2022.2.8)
- 28) 石田信伍, 高橋秀典: 焼き物の色, 表面科学, **18** (6), 380-384 (1997)
- 29) 愛知県産業技術研究所常滑窯業技術センター三河窯業試験場: ホウ素含有排水の処理について, https://www.aibsc.jp/nsj/01gijyutsu/080501_01/print.shtml (2022.2.8)
- 30) 稲富茂樹: フェノール樹脂の最近の進歩, ネットワークポリマー, **34** (1), 45-53(2013)
- 31) 経済産業省, 環境省: PRTR排出量等算出マニュアル第4.1版第III部資料編, 222-290,426-437 (2011)

- 32) 瀬尾建男: 省エネ新 PO 単産法, 化学工学会第 74 年会, (2009)
- 33) 環境省: ヘキサメチレン=ジイソシアネート, <https://www.env.go.jp/chemi/report/h28-02/pdf/chpt1/1-2-2-13.pdf> (2022.2.8)
- 34) 船津 実, 稲田正見, 喜多久博: ポリウレタン生成反応における第三アミン類の触媒能, 工業化学雑誌, 65 (9), 106-110(1962)
- 35) 環境省: 化学物質ファクトシート, 536 (2012), <http://www.env.go.jp/chemi/communication/factsheet.html> (2022.2.8) (以降, 化学物質ファクトシートの URL については記載を省略する.)
- 36) 環境省: 化学物質ファクトシート, 63 (2012)
- 37) 環境省: 化学物質ファクトシート, 647 (2012)
- 38) 環境省: 化学物質ファクトシート, 788 (2012)
- 39) 環境省: 1-ブロモプロパン, <https://www.env.go.jp/chemi/report/h26-01/pdf/chpt1/1-2-2-10.pdf> (2022.2.8)
- 40) 環境省: 化学物質ファクトシート, 840 (2012)
- 41) 中尾統一: 新しいセルロース溶剤, 繊維と工業, 4 (3), 128-134 (1971), https://www.jstage.jst.go.jp/article/fiber1968/4/3/4_3_128/_pdf (2022.2.8)
- 42) 大塚三郎, 大内辰郎, 井本 稔: ナフタリンとホルムアルデヒドとの反応, 第23回熱硬化性樹脂講演討論会講演要旨集, 23, 29-32(1973)
- 43) 公益財団法人石油学会: 石油豆知識[溶剤], <https://www.sekiyu-gakkai.or.jp/jp/dictionary/petdicsolvent.html>(2022.2.8)
- 44) 環境省: エチレングリコールモノエチルエーテル, <https://www.env.go.jp/chemi/report/h17-21/pdf/chpt1/1-2-2-01.pdf> (2022.2.8)
- 45) 環境省: 酢酸 2-メトキシエチル, <https://www.env.go.jp/chemi/report/h28-02/pdf/chpt1/1-2-2-04.pdf> (2022.2.8)
- 46) 本山良三: ポリアルキレンオキサイドの製造とその用途, 有機合成化学, 23 (3), 267-272 (1965)
- 47) 環境省: 化学物質ファクトシート, 869 (2012)
- 48) 斉藤光雄: 表面処理工場の鉛含有系排水処理対策, 表面技術, 48 (3), 251-255 (1997)
- 49) 環境省: 化学物質ファクトシート, 1266 (2012)
- 50) 日本界面活性剤工業会: 界面活性剤ってなんだろう? 界面活性剤の主な性質と種類, <https://jp-surfactant.jp/surfactant/nature/index.html> (2022.2.8)
- 51) 厚生労働省: 職場のあんぜんサイト: ドデシル硫酸ナトリウム, <https://anzeninfo.mhlw.go.jp/anzen/gmsds/151-21-3.html> (2022.2.8)
- 52) 厚生労働省: 職場のあんぜんサイト: ポリ(オキシエチレン)=ドデシルエーテル硫酸エステルナトリウム, <https://anzeninfo.mhlw.go.jp/anzen/gmsds/9004-82-4.html> (2022.2.8)
- 53) 厚生労働省: 職場のあんぜんサイト: 4-ヒドロキシア息香酸メチル, <https://anzeninfo.mhlw.go.jp/anzen/gmsds/99-76-3.html> (2022.2.8)
- 54) 環境省: 化学物質ファクトシート, 86 (2012)
- 55) 桑原里実: 酸化染料染色におけるケラチン繊維表面層での重合・分解反応の寄与に関する研究, 椋山女学園大学大学院博士論文, 7 (2016)
- 56) 環境省: 化学物質ファクトシート, 1093 (2012)
- 57) 中央環境審議会: 特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律に基づく第一種指定化学物質及び第二種指定化学物質の指定の見直しについて(答申), (2020)

附 表

附表1 各指定物質(ノード)に関する情報

物質 指定物質名称 ^(注1) 番号	分類 番号 <small>(注2)</small>	大気排出あり					水域排出あり							
		届出数	推定排 出量 ^(注3)	コミュ ニティ	C _i ^(注4)	主な届出 業種 ^(注5)	主な排出 業種 ^(注5)	届出数	推定排 出量 ^(注3)	コミュ ニティ	C _i ^(注4)	主な届出 業種 ^(注5)	主な排出 業種 ^(注6)	
1 亜鉛の水溶性化合物	第1	209	6	3.01	-	-	金属	金属	144	4.59	#2	0.98	下水、一廃	下水
3 アクリル酸エチル	第4	9	7	2.26	#1	0.71	化学	化学	1	1.08	-	-	化学	化学
4 アクリル酸及びその水溶性塩	第4	17	8	4.07	#1	0.89	化学	化学	2	0.32	-	-	化学	化学
7 アクリル酸n-ブチル	第4	11	8	2.71	#1	0.58	化学	化学	2	1.64	-	-	化学	化学
8 アクリル酸メチル	第4	5	4	2.78	#1	1.00	化学、プラ	化学	1	-1.00	-	-	化学	化学
9 アクリロニトリル	第4	11	8	2.70	#1	0.76	化学	化学、倉庫	1	-0.52	-	-	化学	化学
13 アセトニトリル	第4	11	8	3.91	#5	NaN	化学、医薬	医薬	2	1.06	-	-	化学、医薬	医薬
20 2-アミノエタノール	第3	27	1	-0.30	-	-	石製	石製	4	1.01	#4	1.00	化学	化学
23 p-アミノフェノール	第8	4	0	-	-	-	-	-	3	0.00	#4	1.00	化学	化学
48 EPN	第10	140	0	-	-	-	-	-	50	3.26	#2	0.98	一廃	下水
53 エチルベンゼン	第6	920	911	6.07	#4	0.69	燃料	輸機	1	0.52	-	-	化学	化学
56 エチレンオキシド	第3	13	7	3.05	#7	NaN	化学、医機	医薬、化学	0	-	-	-	-	-
57 エチレングリコールモノエチル エーテル	第3	12	11	4.41	#6	0.60	化学、金属	輸機、金属、電機	0	-	-	-	-	-
68 1,2-エポキシプロパン	第3	9	5	3.71	#7	NaN	化学	化学	1	4.08	-	-	倉庫	倉庫
75 カドミウム及びその化合物	第1	141	0	-	-	-	-	-	21	1.66	#2	0.98	下水、一廃	下水
80 キシレン	第6	1,063	1,013	6.27	#4	0.82	燃料	輸機	3	0.85	-	-	化学、医薬	化学、家具
83 クメン	第6	19	16	4.47	#4	0.42	化学	化学	0	-	-	-	-	-
86 クレゾール	第8	9	4	1.68	#3	NaN	化学、石製	輸機、化学	1	-0.70	-	-	医薬	医薬
87 クロム及び3価クロム化合物	第1	243	13	2.77	#2	0.48	鉄鋼、ゴム、輸機	輸機、鉄鋼	76	3.59	#2	0.98	一廃	下水、鉄鋼
88 六価クロム化合物	第1	187	0	-	-	-	-	-	62	2.91	#2	0.98	一廃	下水
113 シマジン	第13	140	0	-	-	-	-	-	16	1.64	#2	0.98	下水、一廃	下水
132 コバルト及びその化合物	第1	30	4	1.56	#2	1.00	窯業、鉄鋼、鉄道	鉄道	2	3.04	-	-	化学、窯業	化学
133 酢酸2-エトキシエチル	第4	8	8	4.56	#6	1.00	輸機、化学	輸機	1	1.15	-	-	化学	化学
134 酢酸ビニル	第4	8	6	3.82	#6	1.00	化学	化学	1	0.78	-	-	化学	化学
144 無機シアン化合物	第8	161	1	4.83	-	-	化学	化学	54	3.26	#2	0.98	一廃	下水
147 チオベンカルブ	第9	140	0	-	-	-	-	-	38	2.46	#2	0.98	一廃、下水	下水
149 四塩化炭素	第2	140	0	-	-	-	-	-	12	1.23	#2	1.00	下水	下水
150 1,4-ジオキサン	第13	144	3	2.92	-	-	化学、石製、金属	金属	42	3.34	#2	0.98	一廃、産廃、下水	化学、下水
157 1,2-ジクロロエタン	第2	143	2	3.60	-	-	化学	化学	21	1.75	#2	0.98	下水、一廃	下水
158 1,1-ジクロロエチレン	第2	140	1	1.30	-	-	石製	石製	36	2.74	#2	0.98	一廃、下水	下水
159 シス-1,2-ジクロロエチレン	第2	140	0	-	-	-	-	-	42	2.50	#2	0.98	一廃、下水、産廃	下水
179 1,3-ジクロロプロペン	第2	140	0	-	-	-	-	-	11	1.22	#2	1.00	下水	下水
186 ジクロロメタン	第2	202	60	5.67	#5	0.00	金属	金属	37	2.30	#2	0.98	一廃、下水	下水
213 N,N-ジメチルアセトアミド	第4	13	10	4.09	#5	1.00	化学	化学	1	2.23	-	-	繊維	繊維
232 N,N-ジメチルホルムアミド	第4	21	16	4.86	#5	0.33	化学	化学	2	3.07	-	-	繊維、化学	繊維
237 水銀及びその化合物	第1	140	0	-	-	-	-	-	10	0.95	#2	1.00	下水	下水
240 スチレン	第6	48	42	5.09	#1	0.36	化学	化学	2	1.77	-	-	化学	化学
242 セレン及びその化合物	第1	142	2	2.11	-	-	窯業、非鉄	窯業	46	2.24	#2	0.98	一廃、下水	下水
243 ダイオキシン類	第13	237	143	3.94	#6	0.54	一廃	鉄鋼	90	1.56	#2	1.00	一廃	化学、下水
262 テトラクロロエチレン	第2	147	7	4.01	-	-	洗濯、商検	洗濯	13	1.30	#2	1.00	下水、一廃	下水
268 チウラム	第5	146	0	-	-	-	-	-	28	1.94	#2	0.98	一廃、下水	下水
272 銅水溶性塩(錯塩を除く)	第1	167	0	-	-	-	-	-	91	3.60	#2	0.98	下水、一廃	下水
275 ドデシル硫酸ナトリウム	第5	10	1	-0.10	-	-	化学	化学	4	1.73	#3	1.00	化学	化学
277 トリエチルアミン	第3	21	11	3.85	#6	0.67	化学、輸機	輸機	0	-	-	-	-	-
279 1,1,1-トリクロロエタン	第2	140	0	-	-	-	-	-	13	1.61	#2	1.00	下水、一廃	一廃、下水
280 1,1,2-トリクロロエタン	第2	140	0	-	-	-	-	-	26	1.68	#2	0.98	一廃、下水	下水
281 トリクロロエチレン	第2	155	15	4.77	#5	NaN	金属	金属	17	2.27	#2	1.00	下水、一廃	化学、下水
296 1,2,4-トリメチルベンゼン	第6	872	820	5.62	#4	0.82	燃料	輸機	1	0.30	-	-	化学	化学
297 1,3,5-トリメチルベンゼン	第6	663	496	5.22	#4	0.44	燃料	輸機	0	-	-	-	-	-
298 トリレンジイソシアネート	第9	25	9	2.67	#5	NaN	化学、プラ	化学	0	-	-	-	-	-
300 トルエン	第6	1,068	1,057	6.55	#4	0.90	燃料	輸機、プラ	5	3.85	-	-	化学、紙	紙
301 トルエンジアミン	第7	5	0	-	-	-	-	-	3	0.04	#4	1.00	化学	化学
302 ナフタレン	第11	28	19	4.26	#6	0.42	化学、輸機	輸機、金属	0	-	-	-	-	-
304 鉛	第1	27	8	1.27	-	-	非鉄、輸機	金属	4	0.65	#1	0.00	輸機	輸機
305 鉛化合物	第1	172	6	2.43	#2	1.00	窯業、金属	鉄鋼、金属	54	2.79	#1	0.92	一廃、下水	鉄鋼、下水
308 ニッケル	第1	90	8	2.01	#2	1.00	輸機、金属	輸機、鉄道	3	1.18	-	-	紙、窯業、輸機	窯業、紙、輸機
309 ニッケル化合物	第1	86	9	1.92	#2	0.52	鉄鋼、窯業、輸機	窯業、輸機	40	3.75	#1	0.00	金属、輸機	鉄鋼、金属
332 砒素及びその無機化合物	第1	142	1	-0.22	-	-	非鉄	非鉄	56	2.72	#2	0.98	下水、一廃	下水
334 4-ヒドロキシ安息香酸メチル	第9	4	0	-	-	-	-	-	3	1.00	#3	1.00	化学	化学
349 フェノール	第8	42	24	4.50	#3	0.33	窯業、化学	窯業	4	3.44	-	-	化学	化学
374 ふっ化水素及びその水溶性塩	第1	176	11	2.43	#2	0.50	化学	化学	132	5.19	#2	0.98	一廃、下水	下水、鉄鋼
384 1-プロモプロパン	第2	22	22	5.31	#5	0.00	金属	金属、一機	0	-	-	-	-	-
389 ヘキサデシルトリメチル アンモニウムクロリド	第3	6	0	-	-	-	-	-	4	0.85	#4	1.00	化学、鉄鋼	鉄鋼
391 ヘキサメチレンジイソシアネート	第5	9	3	2.14	#4	1.00	化学	化学	0	-	-	-	-	-
392 n-ヘキサン	第2	781	776	5.96	#4	1.00	燃料	食料、紙	3	2.34	-	-	紙、化学、輸機	紙
400 ベンゼン	第6	871	728	4.51	#4	1.00	燃料	鉄鋼、化学、燃料	33	2.96	#2	0.98	一廃、下水	化学
405 ほう素化合物	第1	236	11	2.23	#2	0.83	窯業	窯業	141	4.87	#2	0.98	下水、一廃	下水
406 ポリ塩化ビフェニル(別名PCB)	第11	140	0	-	-	-	-	-	11	1.08	#2	1.00	下水	下水
407 ポリ(オキシエチレン)＝アルキル エーテル	第3	48	3	1.04	-	-	化学、窯業	化学、窯業	13	3.89	#3	0.43	化学、輸機	非鉄、輸機
409 ポリ(オキシエチレン)＝ドデシル エーテル硫酸エステルナトリウム	第5	13	1	0.57	-	-	化学	化学	3	2.12	#3	1.00	化学	化学
411 ホルムアルデヒド	第3	48	41	4.45	#6	0.33	化学、輸機	輸機、プラ	2	1.23	-	-	化学	化学
412 マンガン及びその化合物	第1	278	22	2.94	#2	0.33	窯業、輸機	鉄鋼、一機	115	4.68	#2	0.98	下水、一廃	下水
415 メタクリル酸	第4	16	8	1.92	#1	0.61	化学	化学	1	1.00	-	-	化学	化学
416 メタクリル酸2-エチルヘキシル	第4	5	3	0.88	#6	1.00	化学	化学	0	-	-	-	-	-
417 メタクリル酸2,3-エポキシプロピ	第4	10	3	1.12	#1	1.00	化学	化学	0	-	-	-	-	-
419 メタクリル酸n-ブチル	第4	9	4	1.65	#1	0.95	化学	化学	1	-0.70	-	-	化学	化学
420 メタクリル酸メチル	第4	26	23	4.06	#1	0.54	化学	一機	2	1.59	-	-	化学	化学
438 メチルナフタレン	第11	127	112	3.68	#6	0.90	-	-	0	-	-	-	-	-
453 モリブデン及びその化合物	第1	33	4	2.08	#2	1.00	鉄鋼、窯業、輸機	窯業	5	3.44	#1	NaN	鉄鋼	鉄鋼

注1) 144号については錯塩及びシアン酸塩を除く。407号についてはアルキル基の炭素数が12～15のもの及びその混合物に限る。また、表中の一部指定物質には略称を用いており、法において48号はO-エチル=O-4-ニトロフェニル=フェニルホスホノチオアート、113号は2-クロロ-4,6-ビス(エチルアミノ)-1,3,5-トリアジン、147号はN,N-ジエチルチオカルバミン酸S-4-クロロベンジル、268号はテトラメチルチウラムジスルフィドという。

注2) 本表及び本表別表1では第1分類を単に「第1」とし、第2分類以降も同様とする。

注3) 届出の単位はkg(ダイオキシン類はmg-TEQ)であり、ここではその対数をとった。

注4) C_iはノードのクラスター係数を意味する。表9の注を参照。

注5) 本報において主な届出業種とは、ある指定物質について、(ある業種における排出あり届出数)×100/(全業種における排出あり届出数)≥20%を満たす業種のことをいう。

注6) 本報において主な排出業種とは、ある指定物質について、(ある業種からの推定排出量)×100/(全業種からの推定排出量)≥20%を満たす業種のことをいう。

附表1別表1 規則別表に定める対応化学物質分類

分類番号	分類内容	番号
第1	無機化合物及び有機金属化合物	1, 11, 31, 33, 44, 71, 75, 77, 82, 87, 88, 132, 137, 144, 234, 235, 237, 239, 242, 272, 304, 305, 307-309, 318, 321, 332, 333, 374, 387, 394, 395, 405, 412, 453, 456
第2	鎖状炭化水素化合物及びハロゲン鎖状炭化水素化合物	36, 72, 94, 13-17, 123, 126-128, 131, 149, 157-159, 161, 163, 164, 176-179, 185, 186, 209, 211, 262, 263, 279-281, 284, 288, 289, 351, 380-382, 384-386, 392
第3	アミン系、ニトロ系、アルコール、エーテル、アルデヒド又はケトンの構造を有する鎖状炭化水素化合物	10, 12, 20, 26, 28, 29, 35, 45, 56-59, 65-68, 73, 84, 85, 145, 218, 219, 223, 224, 226, 257, 269, 273, 274, 276-278, 285, 292, 295, 317, 319, 359, 366, 375, 379, 389, 390, 407, 411, 423, 437
第4	カルボン酸系又はその誘導体の構造を有する鎖状炭化水素化合物	2-9, 13, 14, 16, 51, 60, 98, 99, 122, 133-135, 141, 210, 213, 232, 256, 267, 282, 306, 310, 414-420, 434, 443
第5	その他の鎖状炭化水素化合物	43, 61, 62, 152, 193, 197, 198, 212, 220, 225, 241, 245, 259, 268, 275, 313, 328, 329, 331, 378, 391, 396, 409, 424, 433, 457-459, 462
第6	単環炭化水素化合物及びハロゲン単環炭化水素化合物	53, 80, 83, 97, 109, 110, 125, 165, 181, 202, 240, 290, 296, 297, 300, 397, 398, 400, 436
第7	アミン系、ニトロ系又はアゾ系の構造を有する単環炭化水素化合物	18, 49, 89, 93, 100-102, 111, 112, 156, 166, 167, 169, 174, 200, 203, 205, 214-216, 230, 293, 299, 301, 312, 314-316, 327, 345, 348, 432
第8	アルコール、エーテル、アルデヒド又はケトンの構造を有する単環炭化水素化合物	17, 23, 24, 64, 69, 74, 78, 79, 86, 120, 121, 129, 130, 136, 142, 143, 175, 201, 204, 207, 208, 246, 255, 264, 287, 294, 311, 320, 322, 324, 330, 335, 336, 343, 344, 349, 365, 367, 368, 373, 399, 404, 408, 410, 440, 441, 451
第9	カルボン酸系、硫酸系、窒素酸系、炭酸系若しくはシアン酸系又はこれらの誘導体の構造を有する単環炭化水素化合物及び脂環式単環炭化水素化合物	30, 34, 41, 52, 108, 124, 138-140, 147, 154, 162, 184, 188, 222, 236, 260, 265, 266, 270, 271, 298, 334, 337, 350, 352-356, 358, 361, 369, 376, 401, 413, 425, 428, 442, 444, 445, 449
第10	その他の単環炭化水素化合物	39, 47, 48, 192, 195, 229, 233, 247, 251-254, 362, 460, 461
第11	多環炭化水素化合物	15, 19, 32, 37, 38, 40, 114, 160, 180, 190, 228, 231, 238, 302, 303, 340, 346, 393, 403, 406, 427, 438, 446-448
第12	三原子環から五原子環までの複素環化合物	22, 42, 54, 55, 92, 96, 115-119, 148, 151, 153, 155, 168, 170, 171, 173, 182, 183, 189, 191, 194, 196, 206, 221, 250, 261, 339, 347, 360, 363, 364, 371, 372, 377, 402, 421, 426, 452
第13	その他の複素環化合物	21, 25, 27, 46, 50, 63, 70, 76, 81, 90, 91, 95, 113, 146, 150, 172, 187, 199, 217, 227, 243, 244, 248, 249, 258, 283, 286, 291, 323, 325, 326, 338, 341, 342, 357, 370, 383, 388, 422, 429-431, 435, 439, 450, 454, 455

附表1別表2 業種名と附表1における略語の対応

業種コード	業種名	略語 ^{注)}
1200	食料品製造業	食料
1400	繊維工業	繊維
1700	家具・装備品製造業	家具
1800	パルプ・紙・紙加工品製造業	紙
2000	化学工業	化学
2060	医薬品製造業	医薬
2100	石油製品・石炭製品製造業	石製
2200	プラスチック製品製造業	プラ
2300	ゴム製品製造業	ゴム
2500	窯業・土石製品製造業	窯業
2600	鉄鋼業	鉄鋼
2700	非鉄金属製造業	非鉄
2800	金属製品製造業	金属
2900	一般機械器具製造業	一機
3000	電気機械器具製造業	電機
3100	輸送用機械器具製造業	輸機
3120	鉄道車両・同部分品製造業	鉄道
3230	医療用機械器具・医療用品製造業	医機
3830	下水道業	下水
4400	倉庫業	倉庫
5930	燃料小売業	燃料
7210	洗濯業	洗濯
8620	商品検査業	商検
8716	一般廃棄物処理業	一廃
8722	産業廃棄物処分業	産廃

注) 本報における略語であり、一般的なものではない

附表2 指定物質間の関連(エッジ)に関する情報[大気排出関係]

指定物質X		指定物質Y		指定物質XY			
物質番号	排出あり届出数	物質番号	排出あり届出数	物質番号	併排出届出数	併排出届出数の期待値 ^(注1)	併排出届出数に係る調整残差 ^(注2)
3	7	4	8	3-4	6	0.038	30.82
3	7	7	8	3-7	5	0.038	25.65
3	7	8	4	3-8	3	0.019	21.76
3	7	9	8	3-9	4	0.038	20.48
3	7	240	42	3-240	6	0.199	13.24
3	7	415	8	3-415	7	0.038	35.99
3	7	419	4	3-419	4	0.019	29.06
3	7	420	23	3-420	6	0.109	18.05
4	8	7	8	4-7	4	0.043	19.14
4	8	8	4	4-8	3	0.022	20.34
4	8	9	8	4-9	4	0.043	19.14
4	8	240	42	4-240	5	0.227	10.19
4	8	415	8	4-415	6	0.043	28.81
4	8	419	4	4-419	3	0.022	20.34
4	8	420	23	4-420	5	0.124	13.98
7	8	8	4	7-8	3	0.022	20.34
7	8	9	8	7-9	3	0.043	14.30
7	8	240	42	7-240	7	0.227	14.47
7	8	415	8	7-415	5	0.043	23.97
7	8	417	3	7-417	3	0.016	23.53
7	8	419	4	7-419	4	0.022	27.18
7	8	420	23	7-420	8	0.124	22.58
8	4	415	8	8-415	3	0.022	20.34
8	4	420	23	8-420	4	0.062	15.95
9	8	240	42	9-240	5	0.227	10.19
9	8	415	8	9-415	4	0.043	19.14
9	8	420	23	9-420	5	0.124	13.98
53	911	80	1,013	53-80	910	623.122	32.95
53	911	296	820	53-296	775	504.402	29.07
53	911	297	496	53-297	493	305.102	21.26
53	911	300	1,057	53-300	876	650.187	26.68
53	911	392	776	53-392	734	477.337	27.45
53	911	400	728	53-400	719	447.811	28.97
56	7	68	5	56-68	4	0.024	25.97
57	11	133	8	57-133	4	0.059	16.27
57	11	302	19	57-302	5	0.141	13.07
80	1,013	296	820	80-296	814	560.878	28.46
80	1,013	297	496	80-297	495	339.263	18.44
80	1,013	300	1,057	80-300	941	722.985	26.96
80	1,013	392	776	80-392	754	530.782	24.98
80	1,013	400	728	80-400	727	497.950	25.61
83	16	277	11	83-277	5	0.119	14.29
83	16	302	19	83-302	5	0.205	10.71
83	16	391	3	83-391	3	0.032	16.59
86	4	349	24	86-349	3	0.065	11.64
87	13	132	4	87-132	3	0.035	15.91
87	13	305	6	87-305	3	0.053	12.93
87	13	308	8	87-308	6	0.070	22.54
87	13	309	9	87-309	7	0.079	24.81
87	13	412	22	87-412	11	0.193	24.89
87	13	453	4	87-453	3	0.035	15.91
132	4	309	9	132-309	3	0.024	19.17
132	4	412	22	132-412	4	0.059	16.31
134	6	415	8	134-415	3	0.032	16.56
213	10	232	16	213-232	5	0.108	15.02
240	42	415	8	240-415	6	0.227	12.33
240	42	417	3	240-417	3	0.085	10.15
240	42	419	4	240-419	4	0.113	11.72
240	42	420	23	240-420	11	0.652	13.10
277	11	302	19	277-302	4	0.141	10.38
277	11	391	3	277-391	3	0.022	20.04
296	820	297	496	296-297	489	274.625	23.74
296	820	300	1,057	296-300	790	585.240	23.68
296	820	392	776	296-392	743	429.656	32.80
296	820	400	728	296-400	718	403.079	32.93
297	496	300	1,057	297-300	490	353.999	16.57
297	496	392	776	297-392	460	259.889	22.06
297	496	400	728	297-400	452	243.814	22.93
300	1,057	392	776	300-392	758	553.837	23.50
300	1,057	400	728	300-400	725	519.579	23.62
302	19	411	41	302-411	11	0.526	14.74
302	19	419	4	302-419	3	0.051	13.12
305	6	309	9	305-309	3	0.036	15.60
308	8	412	22	308-412	5	0.119	14.30
309	9	374	11	309-374	3	0.067	11.42
309	9	405	11	309-405	3	0.067	11.42
309	9	412	22	309-412	7	0.134	18.98
309	9	453	4	309-453	3	0.024	19.17
349	24	411	41	349-411	10	0.664	11.71
374	11	405	11	374-405	3	0.082	10.29
392	776	400	728	392-400	719	381.450	35.13
405	11	412	22	405-412	7	0.163	17.10
411	41	416	3	411-416	3	0.083	10.28
412	22	453	4	412-453	3	0.059	12.17
415	8	419	4	415-419	4	0.022	27.18
415	8	420	23	415-420	7	0.124	19.71
417	3	420	23	417-420	3	0.047	13.80
419	4	420	23	419-420	4	0.062	15.95

注1) 期待値は調整残差を求める過程で算出しており、計算機の中では丸めを行っていないが、本表では表示のスペース上便宜的に小数点以下3桁としている。
 注2) 本表では調整残差10以上の組合せのみ記載している。

附表3 指定物質間の関連(エッジ)に関する情報[水域排出関係]

指定物質X		指定物質Y		指定物質XY			
物質番号	排出あり届出数	物質番号	排出あり届出数	物質番号	併排出届出数	併排出届出数の期待値 ^(注1)	併排出届出数に係る調整残差 ^(注2)
20	4	23	3	20-23	3	0.043	14.39
20	4	301	3	20-301	3	0.043	14.39
20	4	389	4	20-389	3	0.058	12.42
23	3	301	3	23-301	3	0.032	16.64
23	3	389	4	23-389	3	0.043	14.39
48	50	144	54	48-144	48	9.747	15.08
48	50	147	38	48-147	35	6.859	12.78
48	50	158	36	48-158	34	6.498	12.78
48	50	159	42	48-159	38	7.581	13.25
48	50	186	37	48-186	34	6.679	12.55
75	21	113	16	75-113	16	1.213	14.39
75	21	149	12	75-149	12	0.910	12.37
75	21	157	21	75-157	18	1.592	14.07
75	21	268	28	75-268	19	2.123	12.71
75	21	280	26	75-280	18	1.971	12.48
88	62	147	38	88-147	38	8.505	12.36
88	62	159	42	88-159	40	9.401	12.30
113	16	149	12	113-149	12	0.693	14.30
113	16	157	21	113-157	16	1.213	14.39
113	16	179	11	113-179	11	0.635	13.67
113	16	237	10	113-237	10	0.578	13.01
113	16	262	13	113-262	12	0.751	13.70
113	16	268	28	113-268	16	1.617	12.29
113	16	279	13	113-279	12	0.751	13.70
113	16	280	26	113-280	16	1.502	12.80
113	16	406	11	113-406	10	0.635	12.35
144	54	147	38	144-147	36	7.408	12.60
144	54	158	36	144-158	34	7.018	12.17
144	54	159	42	144-159	39	8.188	13.03
147	38	158	36	147-158	36	4.939	16.13
147	38	159	42	147-159	37	5.762	15.21
147	38	186	37	147-186	36	5.076	15.88
147	38	242	46	147-242	32	6.310	12.06
147	38	268	28	147-268	26	3.841	12.84
147	38	280	26	147-280	26	3.567	13.43
147	38	400	33	147-400	31	4.527	14.27
149	12	157	21	149-157	12	0.910	12.37
149	12	179	11	149-179	11	0.477	15.90
149	12	237	10	149-237	10	0.433	15.14
149	12	262	13	149-262	11	0.563	14.56
149	12	279	13	149-279	11	0.563	14.56
149	12	281	17	149-281	11	0.736	12.62
149	12	406	11	149-406	10	0.477	14.39
150	42	159	42	150-159	35	6.368	13.37
157	21	280	26	157-280	18	1.971	12.48
158	36	159	42	158-159	36	5.458	15.22
158	36	186	37	158-186	36	4.809	16.38
158	36	268	28	158-268	25	3.639	12.66
158	36	280	26	158-280	25	3.379	13.25
158	36	400	33	158-400	30	4.289	14.18
159	42	186	37	159-186	36	5.610	14.97
159	42	268	28	159-268	26	4.245	12.09
159	42	280	26	159-280	26	3.942	12.67
159	42	400	33	159-400	31	5.004	13.44
179	11	237	10	179-237	10	0.397	15.84
179	11	262	13	179-262	11	0.516	15.25
179	11	279	13	179-279	11	0.516	15.25
179	11	281	17	179-281	11	0.675	13.24
179	11	406	11	179-406	10	0.437	15.07
186	37	268	28	186-268	25	3.740	12.46
186	37	280	26	186-280	25	3.473	13.04
186	37	400	33	186-400	30	4.408	13.95
237	10	262	13	237-262	10	0.469	14.51
237	10	279	13	237-279	10	0.469	14.51
237	10	281	17	237-281	10	0.614	12.60
237	10	406	11	237-406	9	0.397	14.19
242	46	332	56	242-332	44	9.300	13.95
242	46	400	33	242-400	30	5.480	12.22
262	13	279	13	262-279	13	0.610	16.64
262	13	281	17	262-281	13	0.798	14.44
262	13	406	11	262-406	10	0.516	13.80
268	28	280	26	268-280	26	2.628	15.97
268	28	400	33	268-400	26	3.336	13.95
275	4	334	3	275-334	3	0.043	14.39
275	4	409	3	27			

附表 4-1 #4 に属する指定物質の併排出届出数(燃料小売業)

指定物質	(53)	(80)	(83)	(296)	(297)	(300)	(391)	(392)	(400)
エチルベンゼン(53)		678	0	676	434	678	0	677	678
キシレン(80)	678		0	679	424	684	0	683	681
クメン(83)	0	0		0	0	0	0	0	0
1,2,4-トリメチルベンゼン(296)	676	679	0		424	679	0	679	678
1,3,5-トリメチルベンゼン(297)	434	424	0	424		424	0	424	424
トルエン(300)	678	684	0	679	424		0	683	681
ヘキサメチレン=ジイソシアネート(391)	0	0	0	0	0	0		0	0
n-ヘキサン(392)	677	683	0	679	424	683	0		680
ベンゼン(400)	678	681	0	678	424	681	0	680	

附表 4-2 #4 に属する指定物質の併排出届出数(輸送用機械器具製造業)

指定物質	(53)	(80)	(83)	(296)	(297)	(300)	(391)	(392)	(400)
エチルベンゼン(53)		60	1	30	22	52	0	21	21
キシレン(80)	60		1	41	22	71	0	28	23
クメン(83)	1	1		1	0	1	0	0	0
1,2,4-トリメチルベンゼン(296)	30	41	1		19	37	0	27	21
1,3,5-トリメチルベンゼン(297)	22	22	0	19		22	0	15	14
トルエン(300)	52	71	1	37	22		0	28	23
ヘキサメチレン=ジイソシアネート(391)	0	0	0	0	0	0		0	0
n-ヘキサン(392)	21	28	0	27	15	28	0		20
ベンゼン(400)	21	23	0	21	14	23	0	20	

附表 4-3 #4 に属する指定物質の併排出届出数(化学工業)

指定物質	(53)	(80)	(83)	(296)	(297)	(300)	(391)	(392)	(400)
エチルベンゼン(53)		40	11	23	21	35	3	6	2
キシレン(80)	40		11	23	21	36	3	6	3
クメン(83)	11	11		10	10	10	3	3	1
1,2,4-トリメチルベンゼン(296)	23	23	10		21	22	3	5	1
1,3,5-トリメチルベンゼン(297)	21	21	10	21		20	3	5	2
トルエン(300)	35	36	10	22	20		3	8	2
ヘキサメチレン=ジイソシアネート(391)	3	3	3	3	3	3		1	0
n-ヘキサン(392)	6	6	3	5	5	8	1		1
ベンゼン(400)	2	3	1	1	2	2	0	1	