

4 Vergleich der Verteilungsmodelle

4.1 Vergleich der Modellstrukturen

Für den Modellvergleich wurden möglichst identische Eingabewerte benutzt. Da alle in dieser Studie angewandten Modelle sich vom Mackayschen Fugazitätsprinzip ableiten, sind als Quellen für Unterschiede in den Modellergebnissen folglich nur noch zwei Varianten möglich:

1. Strukturunterschiede (z.B. Art und Anzahl berücksichtigter Kompartimente sowie berücksichtigter Austausch- und Transferprozesse) und
2. unterschiedliche (Abschätz)-Funktionen (z.B. zur Ableitung der benötigten Abbau-, Austausch- und Transferdaten).

Die wesentlichsten Strukturunterschiede der miteinander verglichenen Verteilungsmodelle sind in Tabelle 20 zusammengefasst. In die Tabelle aufgenommen wurden nur Modelleigenschaften, die in mindestens einem Fall von den Modellen verschieden gehandhabt werden.

Deskriptoren	CemoS Level 2	ChemCAN	HAZCHEM	Simple-Box2.0	Simple-Box1.0	CalTOX
Formalismus	Konzentrationen	Fugazitäten	Fugazitäten	Konzentrationen	Konzentrationen	Fugazitäten
Programmiert in	PASCAL	Visual Basic	Basic	Excel	Excel	Excel
Modell-Level	II	III	III	III	III	III
Modellierbare Chemikalientypen	I und II	I und II	I und II	I und II	I und II	Auch ionische org. Subst., sowie anorg. Subst., Radionuklide und Metalle
Standardregion	Keine	24 Regionen Kanadas	10 europäische Regionen und EU(gesamt)	Niederlande	Niederlande	Wohn-, Handels- und Industriegebiete in Kalifornien
Fortsetzung s. nächste Seite						

Tab. 20: Strukturunterschiede in den untersuchten Verteilungsmodellen.

Deskriptoren	CemoS	ChemCAN	HAZCHEM	Simple-	Simple-	CalTOX
--------------	-------	---------	---------	---------	---------	--------

	Level 2			Box2.0	Box1.0	
Unsicherheitsanalyse vorgesehen	Nein	Nein	Nein	Nein	Nein	Ja
Umweltkompartimente						
Luft mit Aerosolen	Nein	Ja	Ja	Ja	Ja	Ja
Boden	1 Bodentyp	1 Bodentyp	2 Bodentypen	3 Bodentypen	3 Bodentypen	3 vertikale Bodenschichten
Biota in Wasser	Ja	Ja	Ja	Ja	Ja	Nein
Terrestrische Vegetation	Ja	Nein	Nein	Optional	Nein	Ja
Diffusive Austauschprozesse						
Wasser/ Aquatisches Biota	Gleichgewichtsverteilung	Gleichgewichtsverteilung	Gleichgewichtsverteilung	Gleichgewichtsverteilung	Kinetik 1.Ordnung	Keine
Advektive Austauschprozesse						
Vom Boden in die Luft	Nein	Nein	Nein	Nein	Nein	Ja
Benötigte Parameter insgesamt						
Substanzparameter ³⁷	18	10	11	29	14	14
Regionalparameter ³⁸	39	45	48	283	142	48

Tab. 20: Strukturunterschiede in den untersuchten Verteilungsmodellen (Fortsetzung).

³⁷ Die teilweise von den Modellen geforderte Angabe des Namens und der CAS-Nummer wurde nicht mitgezählt.

³⁸ Als Regionalparameter wurden nur Parameter gewertet, die zur Berechnung aller Austausch- und Transferprozesse von den jeweiligen Modellen benötigt werden. Aus diesen abgeleitete Zwischenergebnisse (z.B. Verteilungskoeffizienten zwischen im Austausch stehenden Kompartimenten, Z-Werte u. dgl.) wurden nicht mitgezählt. Emissionsdaten wurden als Regionalparameter eingestuft.

Die wichtigsten Unterschiede in den von den Modellen benutzten Abschätzfunktionen (z.B. zur Ableitung benötigter Abbau-, Austausch- und Transferdaten), sind in Tab. 21 zusammengefasst.

Funktionen für	CemoS Level 2	ChemCAN	HAZCHEM	Simple-Box2.0	Simple-Box1.0	CalTOX
Sediment/ Wasser- Verteilung	$K_p =$ $OC(in\%) * K_{OW}$	$K_p =$ $=OC(in\%) * 0,41 * K_{OW}$	$K_p = OC(in\%)$ $* 0,41 * K_{OW}$	$K_p =$ $=OC(in\%)$ $* K_{OW}$	$K_p =$ $=OC(in\%)$ $* K_{OW}$	$K_p = OC(in\%) * 0,48 * K_{OW}$
Aerosol/Luft- Verteilung ³⁹	Nein	$Z_{Aerosol}/Z_{Luft}$ = Funktion von P_L^S	$Z_{Aerosol}/Z_{Luft} =$ Funktion von P_L^S	Partikelge- bundener Anteil = Funktion des Dampf- drucks und des Schmelz- punktes	Partikelge- bundener Anteil = Funktion des Dampf- drucks und des Schmelz- punktes	Partikelgebun- dener Anteil = Funktion des Dampfdrucks und des Schmelzpunk- tes
Verdampfung aus/ Absorpti- on an Wasser	Gleichver- teilung (Level II)	$k_{air} = 5$ m/h; $k_{water} = 0,05$ m/h	$k_{air} = 5$ m/h; $k_{water} = 0,05$ m/h	k_{air} und k_{water} = Funktion u.a. der Windge- schwindig- keit	k_{air} und k_{water} = Funktion u.a. der Windge- schwindig- keit	k_{air} und $k_{water} =$ Funktion u.a. der Wind-/ und Wasserfließge- schwindigkeit
Substanz- abhängige Bodentiefe	Nein	Nein	Nein	Ja	Nein	Ja ⁴⁰
Temperatur- korrektur ⁴¹	Nein	Nein	Nein	Dampf- druck, Was- serlöslich- keit, Abbau- raten	Nein	Nein

Tab. 21: Unterschiede in den von den Verteilungsmodellen benutzten Abschätzfunktionen.

³⁹ P_L^S ist der Dampfdruck der unterkühlten Schmelze der Modells substanz.

⁴⁰ Nur ein Bestandteil der Plausibilitätskontrolle für die Dicke der Wurzelzone.

⁴¹ Nicht dokumentiert wird die bei allen Modellen der Studie benutzte direkte Temperaturabhängigkeit des Z-Werts von Luft.

4.2 Vergleich der Modellergebnisse

Um das *modellierte* Verteilungsverhalten der fünf Modellsubstanzen in Abhängigkeit vom gewählten Modellprogramm miteinander zu vergleichen, wurden die errechneten Massenbilanzen benutzt. Für jede Modellsubstanz gegenüber jeder Modellregion wurden dazu die berechneten Schadstoffmassen in den vier Hauptkompartimenten Luft, Wasser, Boden, Sediment, sowie der Gesamtgehalt in einem Diagramm einander gegenübergestellt⁴². Die Abb. 17 bis 21 zeigen auszugsweise für jede der fünf Modellsubstanzen die Modellergebnisse im Vergleich für die Modellregion Baden-Württemberg. Da die berechneten Lasten zwischen den Kompartimenten teilweise um mehrere Zehnerpotenzen variieren, wurde für eine grafische Darstellung eine logarithmische Auftragung verwendet. Zusätzlich wurden zur Steigerung der Übersichtlichkeit Lasten < 1 kg auf 1 kg gesetzt.

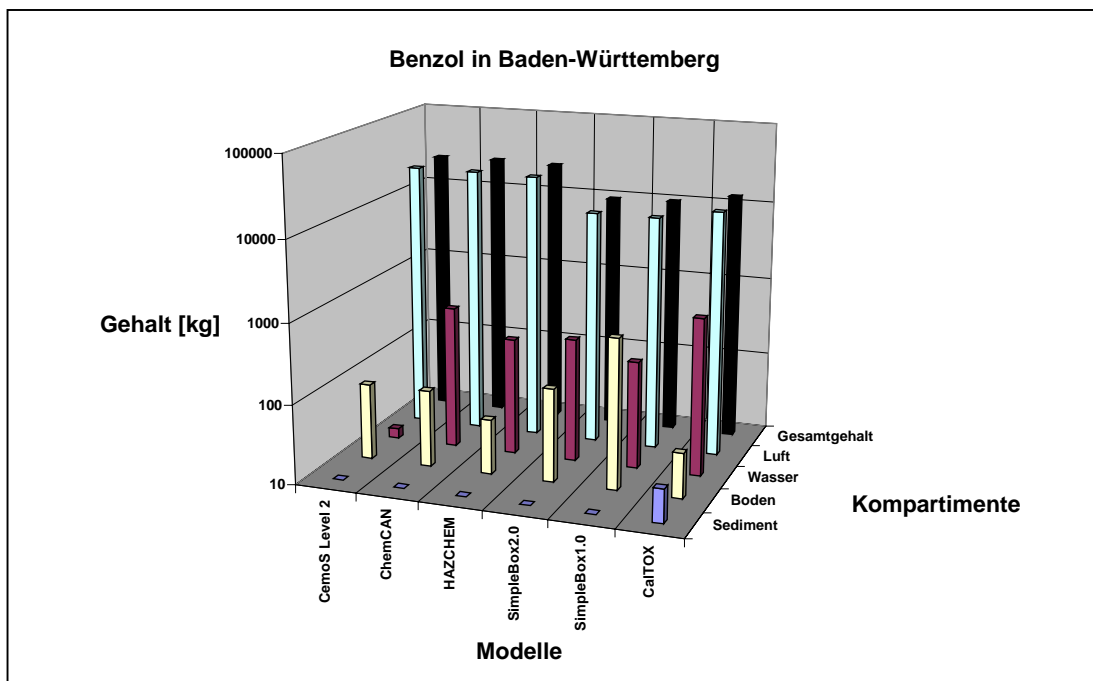


Abb. 17: Vergleich der Modellergebnisse (Lasten in den Hauptkompartimenten und Gesamtgehalt in kg) für die Modellsubstanz Benzol in Baden-Württemberg.

⁴² Ein Vergleich der Lasten in Tabellenform findet sich im Anhang.

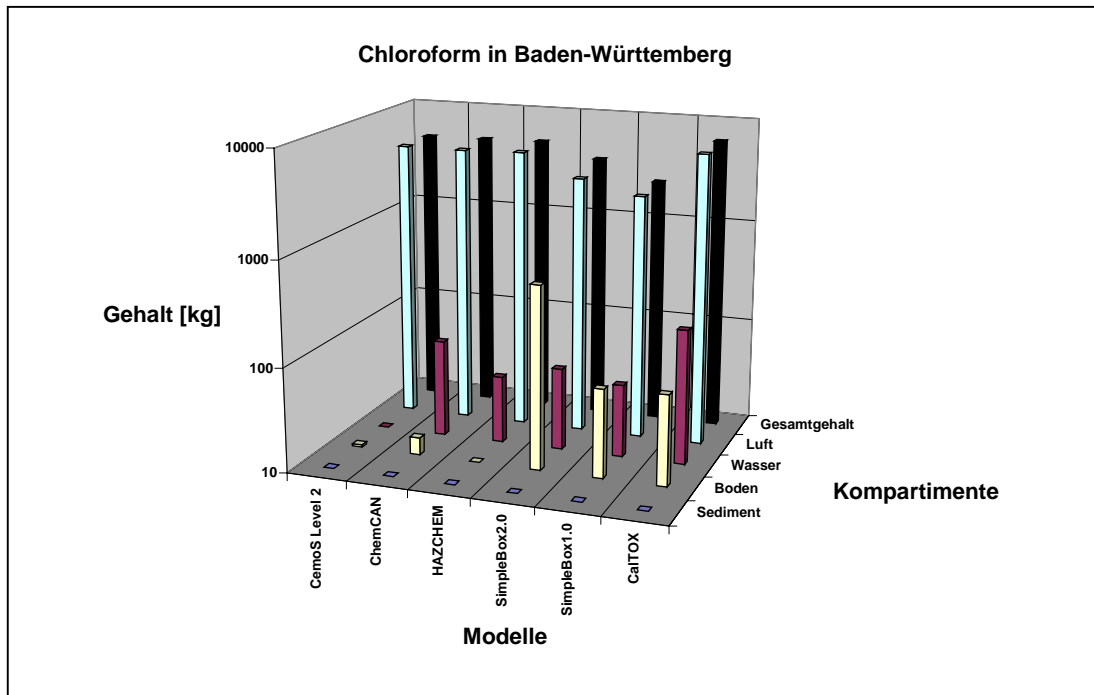


Abb. 18: Vergleich der Modellergebnisse (Lasten in den Hauptkompartimenten und Gesamtgehalt in kg) für die Modells substanz Chloroform in Baden-Württemberg.

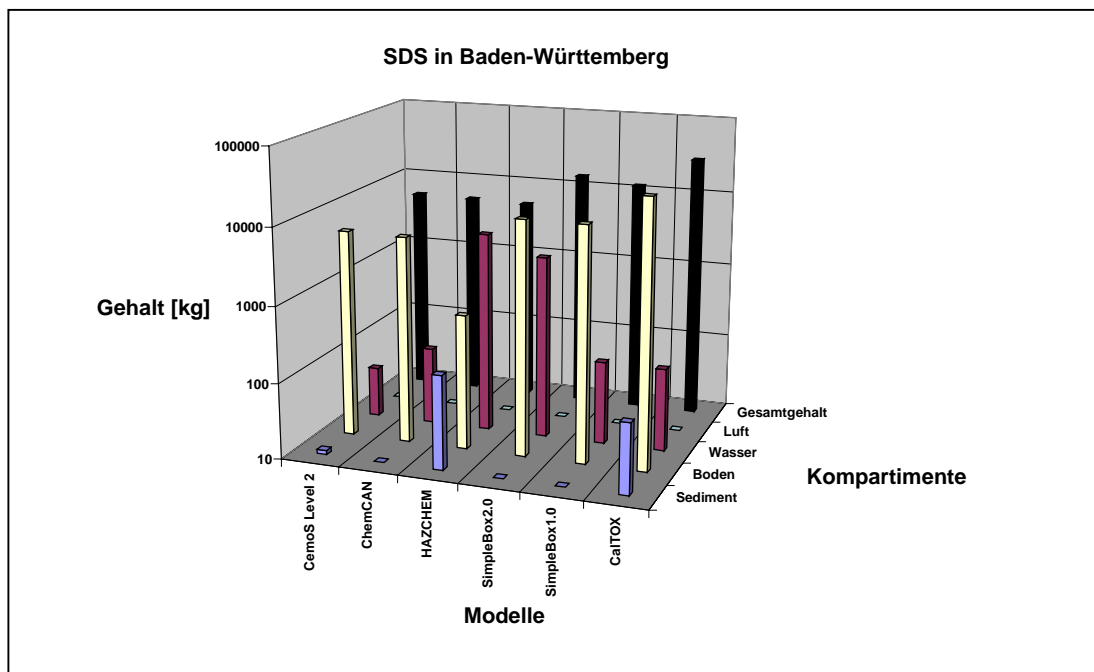


Abb. 19: Vergleich der Modellergebnisse (Lasten in den Hauptkompartimenten und Gesamtgehalt in kg) für die Modells substanz SDS in Baden-Württemberg.

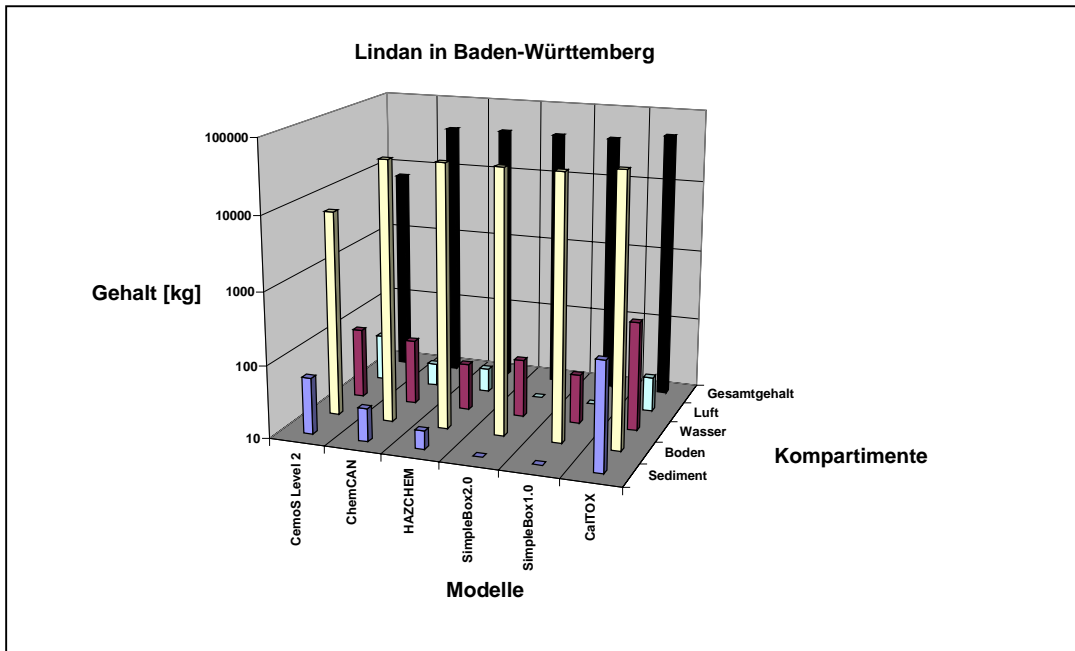


Abb. 20: Vergleich der Modellergebnisse (Lasten in den Hauptkompartimenten und Gesamtgehalt in kg) für die Modellsubstanz Lindan in Baden-Württemberg.

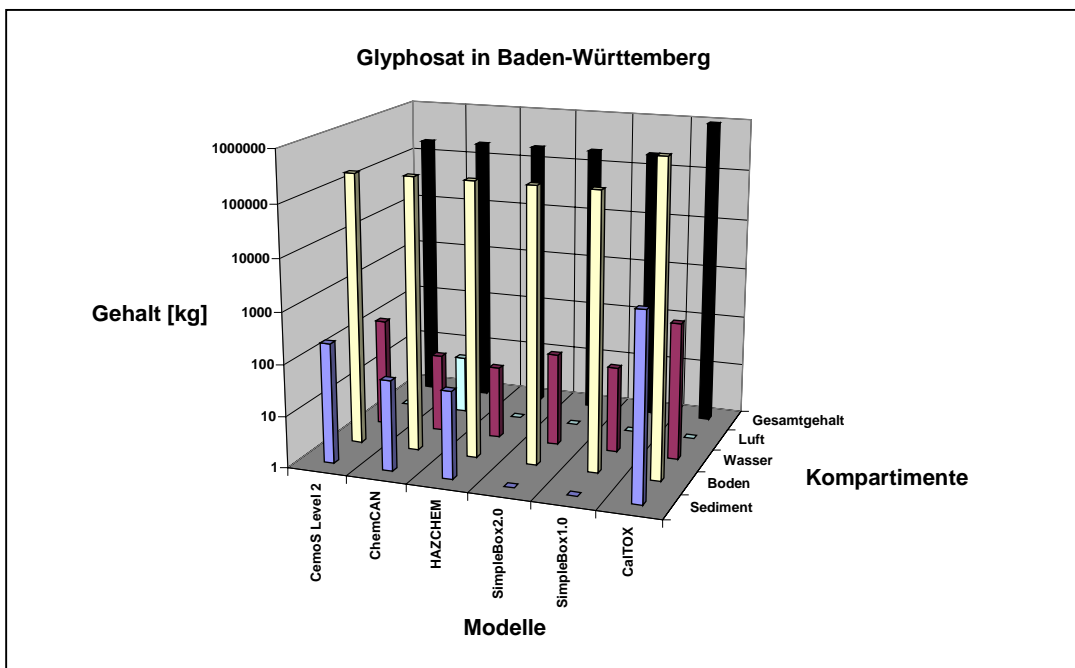


Abb. 21: Vergleich der Modellergebnisse (Lasten in den Hauptkompartimenten und Gesamtgehalt in kg) für die Modellsubstanz Glyphosat in Baden-Württemberg.

4.2.1 Qualitativer Vergleich der Modellergebnisse

Zunächst sollen die von den Modellen errechneten Abfolgen in den Lasten miteinander verglichen werden. Dazu wird für jedes Modell bzgl. jeder Modellsubstanz bestimmt, welches Kompartiment am wenigsten/meisten, welches Kompartiment am zweitwenigsten/-meisten usw. belastet ist. Zwei Lasten werden nur dann als *verschieden* eingestuft, wenn die größere Last mindestens um den Faktor 10 größer als die kleinere Last ist. So ergibt sich z.B. für die Lasten von Benzol in BW unter Verwendung des Programms *CemoS Level 2* die Abfolge: Sediment < Boden, Wasser < Luft. Dieser Abfolgesequenz wird der Buchstabe A zugeordnet. Alle Modelle, die für eine der fünf Testsubstanzen in BW dieselbe Abfolgesequenz errechneten, erhalten denselben Buchstaben. Die auf diese Weise erhaltenen Abfolgen sind in Tab. 22 zusammengefasst.

Programm \ Substanz	CemoS Level 2	Chem-CAN	HAZCHEM	Simple-Box2.0	Simple-Box1.0	CalTOX
Benzol	A	A	A	A	A	B
Chloroform	C	A	A	A	A	A
SDS	D	E	F	G	E	D
Lindan	H	H	H	E	E	D
Glyphosat	D	H	D	E	E	D

Tab.22: Vielfalt an auftretenden Abfolgesequenzen in den Modellergebnissen. Gleiche Buchstaben bedeuten gleiche Abfolge der für die einzelnen Hauptkompartimente berechneten Lasten.

Der Vergleich der errechneten Abfolgen zeigt:

- Keines der untersuchten Modelle liefert für alle Modellsubstanzen die exakt gleichen Abfolgen.
- Die Ergebnisse aus *SimpleBox 2.0* und 1.0 sind am ähnlichsten. Nur für SDS unterscheiden sich auch diese Modelle in ihrer vorhergesagten Abfolge
- Für Benzol und Chloroform liefern die Modelle nahezu gleiche Abfolgen, während bei SDS, Lindan und Glyphosat die Modellergebnisse uneinheitlicher sind. Die größte Varianz in den berechneten Abfolgen tritt für SDS auf.

Bereits aus diesem qualitativen Vergleich der Modellergebnisse ist ersichtlich, dass die verbliebenen Unterschiede in den Modellen (s. Tabellen 20 und 21), bei Substanzen mit niedrigem Dampfdruck (SDS, Lindan und Glyphosat) zu signifikanten Abweichungen in der Vorhersage des Verteilungsverhaltens der betrachteten Modell-

substanzen führen. Dagegen wird das Verhalten der Stoffe mit hohem Dampfdruck (Benzol, Chloroform) von den Modellen weitgehend gleich eingestuft.

4.2.2 Einfluss der Modellregion auf die Ergebnisse der Verteilungsmodellierung

Um den Einfluss der Modellregion auf die Ergebnisse der sechs in dieser Studie untersuchten Verteilungsmodelle für die 15 Szenarien (= 5 Testsubstanzen x 3 Regionen) zu bestimmen, wurde eine Hauptfaktorenanalyse (engl. Principal Component Analysis, kurz: PCA) durchgeführt (s. Abb. 22). Die Hauptfaktorenanalyse stellt eine mathematische Prozedur dar, um eine Gruppe korrelierter Variablen in eine möglichst kleinere Gruppe unkorrelierter Variablen, Hauptfaktoren genannt, umzuformen. Der erste Hauptfaktor erklärt so viel von der Gesamtvarianz der Daten, und jeder weitere Hauptfaktor soviel von der verbleibenden Varianz, als möglich.

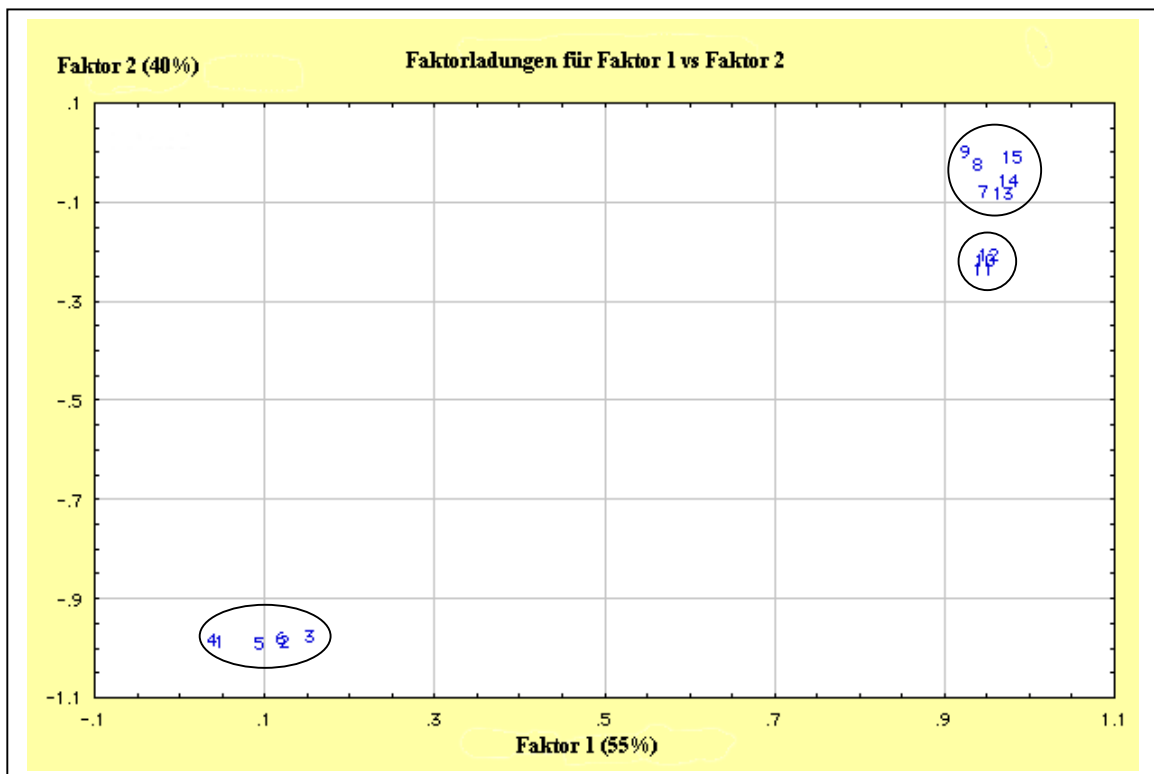


Abb.22: Hauptfaktorenanalyse mit den 6 Verteilungsmodellen als Variablen und den 15 Szenarien (5 Testsubstanzen x 3 Regionen: 1 = Benzol in Baden-Württemberg (BW); 2 = Benzol in Deutschland (D); 3 = Benzol in Europa (E); 4 = Chloroform in BW; 5 = Chloroform in D; 6 = Chloroform in E; 7 = SDS in BW; 8 = SDS in D; 9 = SDS in E; 10 = Lindan in BW; 11 = Lindan in D; 12 = Lindan in E; 13 = Glyphosat in BW; 14 = Glyphosat in D; 15 = Glyphosat in E) als Fällen. Wiedergegeben sind die Faktorladungen nach einer Varimax-Rotation. In Klammern ist der Varianzerklärungsanteil des jeweiligen Hauptfaktors angegeben.

Abb. 22 zeigt das Ergebnis der PCA nach erfolgter Extraktion unter Anwendung des Kaiserkriteriums [Backhaus et al., 1989], d.h. nur die Faktoren mit einem Eigenwert > 1 wurden extrahiert. Die beiden Faktoren besitzen gemeinsam einen Varianzerklärungsanteil von 95 %. Benachbarte Punkte entsprechen Modellergebnissen von Szenarien, die sich in Ihren Lastenverhältnissen sehr ähnlich sind. Grafisch hervorgehoben sind drei Bereiche A, B und C. In Bereich A sind alle Szenarien vereint die mit den Testsubstanzen Benzol und Chloroform durchgeführt wurden. Bereich B umfasst alle Szenarien für Lindan, Bereich C alle Szenarien für SDS und Glyphosat. Deutlich wird, dass der Wechsel der Modellregionen unter Beibehaltung derselben Modellsubstanz nur einen sehr geringen Effekt auf die Modellergebnisverhältnisse hat. Das bedeutet auch, dass die Einstufung des Verteilungsverhaltens der Testsubstanzen unabhängig von den gewählten Testregionen dieser Studie ist. Die Unterschiede in den Regionalparametern führen zwar zu Änderungen der Absolutlasten, die Lastenverhältnisse bleiben aber praktisch konstant. *Leichte* Varianzen in den Verhältnissen der Regionalparameter (z.B. der Wasserbilanzen) führen somit zu *keinen* drastischen Effekten im Modellergebnis. Dies zeigt, dass die für eine Modellierung des Verteilungsverhaltens sensitiven Parameter an anderer Stelle zu suchen sind. Die Größe der Modellregion ist folglich weniger entscheidend, als vielmehr die Qualität der Datelage über diese Modellregion. Beispielsweise ist zu erwarten, dass die gewählten Emissionszenarien für die Modellergebnisse sehr sensitive Eingabewerte darstellen. Folglich lässt sich diejenige Modellregion besser modellieren, bei der man über die genaueren Emissionsdaten verfügt.

4.2.3 Einzelbetrachtung der Stoffverteilungen

Ohne eine Sensitivitätsanalyse lassen sich diejenigen Parameter, die am Wesentlichsten für die Unterschiede in den Ergebnissen der Modellprogramme verantwortlich sind, nicht in jedem Fall zweifelsfrei bestimmen. Aus diesem Grund können im Folgenden nur vereinzelt genauere Angaben über Ursachen der auftretenden Schwankungen gemacht werden.

Benzol und Chloroform in Baden-Württemberg:

Auffällig ist zunächst die ca. halb so große Gesamtlast bzw. Last in Luft in *SimpleBox2.0* und 1.0 gegenüber den anderen Modellen (s. Abb. 17 und 18). Dies geht primär auf den *errechneten* advektiven Transport von Benzol und Chloroform über Luft in die regionale Einheit aus der kontinentalen Einheit zurück. Während die anderen Programme die über Luft in die Region transportierte Menge Benzol aus dem Luftaustausch und einer *vom Anwender anzugebenden* Hintergrundkonzentration der einströmenden Luft berechnen, *modellieren SimpleBox2.0* und *SimpleBox1.0* diese

Hintergrundkonzentration. Für Benzol errechnet *SimpleBox2.0* beispielsweise einen advektiven Eintrag via Luft von 80,2 kg/h. Im Gegensatz dazu bedeuten die für diese Studie gewählten Eingabewerte bei *ChemCAN* einen advektiven Eintrag über Luft von 1155 kg/h. Die Hintergrundkonzentration in Luft solcher Substanzen hat also einen signifikanten Einfluss auf das Modellergebnis.

Eine solche Abschätzung der Hintergrundkonzentration ist bei der Bewertung von neuen Stoffen unumgänglich, da für diese in der Regel keine Messdaten aus der Umwelt vorliegen. Werden dagegen alte Stoffe modelliert bzw. Stoffe für die ausreichend Messwerte in den betrachteten Umweltmedien existieren, sollte auf eine solche separate Modellierung verzichtet werden.

Für die Abweichung der Chloroformlast in Luft zwischen *SimpleBox2.0* und 1.0 dürften analog die in *SimpleBox2.0* modellierten globalen Zonen verantwortlich sein: während in *SimpleBox1.0* der advektive Austrag aus der kontinentalen Luft einem Austrag aus dem System gleichkommt, entspricht dieser Austrag in *SimpleBox2.0* einem Eintrag für die globalen Zonen, der wiederum für eine Abschätzung der Hintergrundkonzentration der in die kontinentale Einheit zurückströmenden Luft benutzt wird. Bei der wesentlich kleineren Abbaurate von Chloroform gegenüber Benzol hat dies zur Folge, dass kontinental ausgetragenes Chloroform über eine globale Verteilung wieder in die kontinentale und somit auch in die regionale Einheit zurückgelangen kann. Dieser Effekt, war beim Benzol nicht zu beobachten. Dies zeigt, dass ein struktureller Unterschied in den Modellen nicht notwendigerweise eine Veränderung des Modellergebnisses zur Folge hat. Eine Sensitivitätsanalyse sollte folglich für jede zu modellierende Substanz separat durchgeführt werden.

Die errechneten Unterschiede in der Bodenlast zwischen *SimpleBox2.0* und 1.0 dürften hauptsächlich auf die substanzabhängige Bodentiefe und die temperaturabhängigen physikalisch-chemischen Parameter von Version 2.0 zurückzuführen sein. Die Schwankungen zwischen den berechneten Lasten innerhalb desselben Kompartimentes (vgl. Tab. 23) liegen zwischen null (Chloroformlast in Luft) und zwei Zehnerpotenzen (Benzollast in Sediment).

Substanz Komp.	Benzol in BW	Chloroform in BW	SDS in BW	Lindan in BW	Glyphosat in BW
Sediment	2	1	3	2	4
Boden	1	1	2	1	0
Wasser	1	2	2	1	1
Luft	1	0	1	2	2
Gesamtgehalt	1	0	1	1	0

Tab.23: Maximale Abweichung der errechneten Lasten für die Hauptkompartimente in Zehnerpotenzen bei Variation des verwendeten Modellprogramms.

Lindan und Glyphosat in Baden-Württemberg

Alle Modelle werten den Boden als dasjenige Kompartiment mit der größten Last an Lindan und Glyphosat (s. Abb. 20 und 21). Da *CalTOX* ein im Vergleich zu allen anderen Modellen wesentlich größeres Gesamtbodenkompartiment enthält, liefert die Modellierung mit diesem Programm notwendigerweise die höchsten Lasten im Boden und somit Gesamtgehalte. Die geringe Lindanlast im Boden für *CemoS Level 2* ist direkte Folge des angenommenen generellen thermodynamischen Gleichgewichtszustandes in diesem Modell. Die starken Abweichungen in den Sedimentlasten gehen dagegen hauptsächlich auf die sehr geringen, errechneten Lasten (< 1 kg) in *Simple-Box2.0* und 1.0 zurück. Hintergrund sind dabei die in diesen Modellen verwendeten Funktionen zur Berechnung der Verteilungskoeffizienten Sediment/Wasser und suspendiertes Sediment/Wasser, sowie die berücksichtigte Temperaturabhängigkeit des Henrykoeffizienten. Für die übrigen Kompartimente liegen die Schwankungen zwischen den berechneten Lasten (vgl. Tab. 23) innerhalb desselben Kompartimentes wie bei Benzol und Chloroform zwischen null (Glyphosatlast im Boden) und zwei Zehnerpotenzen (Lindanlast in Luft).

SDS in Baden-Württemberg

Bezüglich der modellierten Abfolgen treten die größten Unstimmigkeiten bei der Testsubstanz SDS auf (s. Abb. 19). Die Schwankungen zwischen den berechneten Lasten innerhalb desselben Kompartimentes liegen zwischen ein (Last in Luft) und drei Zehnerpotenzen (Last in Sediment).

Besonders auffällig ist dabei die Umkehr der Lastenabfolge im Verhältnis Boden zu Wasser im Modell *HAZCHEM*. Hauptverantwortlich dabei ist das in diesem Programm benutzte Kläranlagenmodell. Dies soll in einem näheren Vergleich von *ChemCAN* und *HAZCHEM* verdeutlicht werden: für *ChemCAN* galt in dieser Studie

die Annahme, dass nur 2 % der Jahresproduktion von SDS ins offene Wasser und 30 % per Klärschlamm in das Bodenkompartment gelangen sollten. Für den Rest wurde angenommen, dass dieser abgebaut würde (vgl. Kap. 2.2.3). Das Kläranlagenmodell von *HAZCHEM* errechnet dagegen eine Emission von ca. 86 % in das Wasserkompartment, ca. 3 % in den Boden bei nur ca. 11 % Verlust durch Abbau. Dies bewirkt unmittelbar eine völlig unterschiedliche Bewertung der resultierenden Lasten im Wasser durch beide Modelle. Werden in *ChemCAN* die aus *HAZCHEM* errechneten Emissionsdaten eingesetzt, ergeben sich praktisch identische Resultate.

Kläranlagenmodelle sind auch Bestandteil von *SimpleBox2.0* und 1.0. Allerdings sind die in diesen Modellen verwendeten Algorithmen mit denen in *HAZCHEM* nicht identisch und die berechneten Abfolgen stimmen mehr mit denen der übrigen Modelle überein. Für die Unterschiede in den Wasserlasten beider Modelle dürften, analog zur Chloroformlast in Luft, die in *SimpleBox2.0* modellierten globalen Zonen verantwortlich sein: in *SimpleBox1.0* kommt der advective Austrag aus kontinentalem Wasser einem Austrag aus dem System gleich, während dieser Austrag in *SimpleBox2.0* einem Eintrag für die globalen Zonen entspricht, der wiederum für eine Abschätzung der Hintergrundkonzentration des in die kontinentale Einheit zurückfließenden Wassers benutzt wird. Die Modellergebnisse für die Verbindung SDS zeigen somit eine hohe Sensitivität gegenüber den gewählten Emissionsszenarien.

Die, im Vergleich zu allen anderen Modellen, hohe Bodenlast bei Verwendung des Modells *CalTOX* ist, wie für Lindan und Glyphosat geschildert, auf das in diesem Modell wesentlich größere Gesamtbodenkompartiment zurückzuführen.

Fazit

Obwohl alle in dieser Studie untersuchten Modelle sich aus demselben Ansatz ableiten, weichen sie in ihren Berechnungsergebnissen im Durchschnitt um maximal ein bis zwei Zehnerpotenzen voneinander ab. Diese Abweichungen betreffen sowohl die von den Modellen errechneten Absolutlasten, als auch die Abfolgesequenzen. Davon am wenigsten betroffen ist einzig die Bewertung des am stärksten mit der Modellsubstanz belasteten Kompartiments. Diese Einstufung erfolgt praktisch von allen untersuchten Modellen einheitlich (einzige Ausnahmen: SDS via *HAZCHEM*). Die hohe Uneinheitlichkeit in der Einstufung der weniger belasteten Kompartimente muss als kritisch betrachtet werden. Diese Abweichungen sind so stark, dass selbst das einfacher strukturierte *CemoS Level 2* Modellergebnisse liefert, die keine Sonderstellung dieses Programm erkennbar werden lassen.

Die beobachtete, starke Dynamik muss auf die strukturellen Unterschiede der Modelle und die variierenden Abschätzungsfunktionen zurückgeführt werden. Offen-

sichtlich beeinflussen diese Unterschiede gerade die Einschätzung der weniger belasteten Kompartimente sehr stark. Diese Unterschiede spiegeln im Wesentlichen die voneinander abweichenden Zielsetzungen in der Modellentwicklung wider:

- *CemoS Level 2* wurde für die Lehre,
- *ChemCAN* für eine Verbleibsabschätzung von Chemikalien in Kanada,
- *HAZCHEM*, *SimpleBox2.0* und 1.0 für die Risikobewertung alter und neuer Stoffe
- *CalTOX* zur Bewertung von Bodenaltlasten entwickelt.

Für die Anwendung eines solchen Modells hat dies die Konsequenz, dass eine Optimierung bzw. Anpassung auf der Ebene dieser Struktur- und Abschätzungsfunktionsunterschiede vorgenommen werden muss.

Beispiel Kläranlagenmodell Ja/Nein? Im Falle von SDS hat sich gezeigt, wie ein Kläranlagenmodell die Einstufung des Verteilungsverhaltens fundamental verändern kann. Für die restlichen Verbindungen hatte die Berücksichtigung einer Kläranlage keinen nennenswerten Effekt, d.h. die Modellergebnisse blieben unverändert. Andererseits kann man Sensitivitäten nur dort finden wo man entsprechende Subprozesse überhaupt berücksichtigt hat. Für die Modellierungspraxis hat dies Konsequenzen. Einerseits soll ein Modell validiert werden, d.h. mit Messwerten verglichen und optimiert werden. Andererseits kann eine solche Optimierung immer nur für Einzelstoffe durchgeführt werden, da eine Übertragung der Modellstruktur auf eine Substanz für die keine Validierung vorgenommen wurde, zwangsweise bedeutet, dass nicht sichergestellt werden kann, ob alle relevanten Transfer- und Transportprozesse zur Beschreibung des Verteilungsverhaltens dieser anderen Spezies berücksichtigt wurden. Aus diesen Gründen sollte eine Validierung des Modells mit möglichst vielen und möglichst verschiedenen Substanzen durchgeführt werden, was aber die Kosten der Validierung drastisch erhöht.

5 Zusammenfassung und Empfehlung für ein der Datenlage in BW angepasstes regionales Verteilungsmodell

- Wo verbleiben Emissionen innerhalb Baden-Württembergs?
- Ist Baden-Württemberg ein Export- oder Importland für spezielle Emissionen?
- Welche Emissionsszenarien können die gefundenen Lasten erklären?

Im Rahmen dieser Pilotstudie wurden sechs unterschiedliche Computer-Verteilungsmodelle erfasst und qualitativ sowie quantitativ miteinander verglichen, um dasjenige Modell zu ermitteln, das am geeignetsten ist, die Beantwortung dieser Fragen zu unterstützen.

Dabei zeigte sich, dass grundsätzlich alle in dieser Studie untersuchten Modellprogramme für die Berechnung der Verteilung von Chemikalien zwischen den Umweltkompartimenten Luft, Boden, Wasser, etc. in Baden-Württemberg anwendbar sind. Die erhaltenen Modellierungsergebnisse (absolute Last in kg im jeweiligen Umweltkompartiment) weichen im Durchschnitt um maximal ein bis zwei Zehnerpotenzen voneinander ab. Alle Modelle sahen nur das mit der höchsten Absolutlast belastete Kompartiment einheitlich vorher. Die hohe Variation in der Einschätzung der „geringer belasteten“ Kompartimente ist auf die strukturellen Unterschiede der Modelle zurückzuführen, die wiederum die voneinander abweichenden Zielsetzungen in der jeweiligen Modellentwicklung widerspiegeln. Die gefundenen Abweichungen der Modellergebnisse untereinander sind i.a. geringer, als die in der Fachliteratur dokumentierten Abweichungen zwischen Messwert und Rechenergebnis bei Modellvalidierungsprojekten.

Generell gestalten sich solche Validierungen schwierig aufgrund der in zwei Punkten kritischen Datenlage:

1. **Emissionsszenarien:** Für die meisten Substanzen sind Angaben zu regionalen, *kompartmentsspezifischen* Emissionsmengen schwer ermittelbar oder gar nicht bekannt. Existierende Abschätzfunktionen gelten als unsicher.
2. **Messwerte vor Ort:** Die meisten Erhebungen von Konzentrationen eines Stoffes in Umweltmedien in einer Region geben nicht die Konzentrationen des Stoffes in einem Fließgleichgewichtszustand wider, wie ihn das Verteilungsmodell aber voraussetzt. So werden beispielsweise Wasserproben meistens schadstoffquellennah erhoben. Ein Rückschluss auf die *durchschnittliche* Konzentration für das Wasserkompartiment lässt sich daraus wiederum nur abschätzen.

Über die Toleranz der Eingabewerte sollten daher umfangreiche Sensitivitätsanalysen zu Rate gezogen werden um einerseits zu klären, an welcher Stelle ungenauere Daten toleriert werden können, und andererseits, wo die besonders sorgfältige Auswahl der Messwerte oder Abschätzfunktionen unerlässlich ist.

Aufgrund des in dieser Studie durchgeführten evaluativen Vergleichs kann *nicht* entschieden werden, welches der untersuchten Modelle das *realistischere Abbild* Baden-Württembergs zu liefern vermag. Beantwortet werden kann dagegen zunächst die Frage nach der Anpassbarkeit der Modelle. Die prinzipielle Möglichkeit, Struktur und Funktionen des Modells manuell verändern zu können, ist dazu ein entscheidendes Kriterium. Nur wenn beides vom Anwender verändert werden kann, ist eine bestmögliche Anpassung des Modells an die Datenlage in Baden-Württemberg gewährleistet. Des weiteren wäre es wünschenswert, wenn die Modelle durch Anwendung eines externen Monte Carlo Simulationsprogramms, eine probabilistische Berechnung der Kompartimentlasten bzw. eine Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse durchzuführen, erlauben würden.

Drei der sechs Modelle dieser Studie lagen in Form kompilierter Computerprogramme vor: *CemoS Level 2*, *ChemCAN* und *HAZCHEM*. In dieser Form ist eine strukturelle Veränderung, z.B. das Austauschen einer Korrelationsfunktion, nur möglich, wenn dies vom Programm bereits so angelegt wurde. Von den genannten drei Modellen offeriert nur *CemoS Level 2* teilweise dem Anwender eine solche Option. Zwar sind die diesen Modellen zugrunde liegenden Gleichungen nahezu vollständig von den Modellentwicklern veröffentlicht worden, für die Praxis würde aber eine solche Umstrukturierung die Notwendigkeit des Selbstprogrammierens mit sich bringen. Die kompilierte Form macht auch eine Verknüpfung mit einem externen Monte Carlo Simulationsprogramm schwierig.

Wesentlich günstiger stellen sich diesbezüglich die verbleibenden drei Modelle *SimpleBox2.0*, *SimpleBox1.0* und *CalTOX* dar. Alle drei liegen als Spreadsheet-Datei für Microsoft Excel vor. In dieser Form sind alle, für eine Level III-Modellierung benötigten Parameter, Gleichungen usw. vom Anwender veränderbar. Da verschiedene Monte Carlo Simulationsprogramme als Add-In für Microsoft Excel auf dem Markt sind, gestaltet sich eine Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse unkompliziert. Folglich wäre eine Anpassung an die Datenlage für die Modellregion Baden-Württemberg ohne Neuprogrammierung am ehesten mit den letztgenannten Modellen möglich.

Es stellt sich die Frage nach dem Aufwand der für eine notwendige Anpassung zu leisten wäre und ob letztlich nicht doch eine Neuprogrammierung zu favorisieren wäre.

Die Ursachen für die wichtigsten vorzunehmenden Änderungen dieser Programme liegen in den unterschiedlichen Zielsetzungen bei deren Entwicklung begründet. *CalTOX* beispielsweise ist speziell für Bodenaltlasten konzipiert. Eine Anpassung an baden-württembergische Verhältnisse käme einer Neuprogrammierung gleich. In *SimpleBox2.0* und 1.0 werden viele Daten über eigene Submodule berechnet bzw. modelliert. Z.B. dient die kontinentale Einheit primär der Abschätzung der Einträge für die regionale Einheit über hineinfließendes Wasser bzw. zuströmende Luft. Eine solche Abschätzung ist notwendig, wenn es um die Beurteilung des Verteilungsverhaltens von Stoffen geht, über die *keine* Messwerte vorliegen, z.B. neue Stoffe. Werden dagegen Stoffe modelliert, von denen diesbezüglich Messwerte vorliegen, würde eine *trotzdem* durchgeführte Abschätzung die Unsicherheit des Modellergebnisses unnötig erhöhen.

Zu einer möglichst guten Anpassung an die regionalspezifische Datenlage gehört folglich auch, Abschätzungsalgorithmen nur dann mitaufzunehmen, wenn die begrenzte Datenlage es erfordert, gleichzeitig aber die durch diesen Abschätzungsalgorithmus hinzukommende Unschärfe die Relevanz des Modellergebnisses nicht wesentlich verringert. Speziell in diesem Punkt zeigt sich ferner, dass eine Empfehlung für ein der Datenlage in BW angepasstes regionales Verteilungsmodell ebenfalls nur unter Berücksichtigung der jeweiligen Fragestellung gegeben werden kann. Soll beispielsweise die Unschärfe im Modellergebnis möglichst reduziert werden (und begnügt man sich somit mit einer allgemeinen Aussage über den Trend) oder werden möglichst genaue Hinweise gesucht wo es kritisch werden könnte? Nur wenn z.B. ein Austrag aus der Troposphäre mitmodelliert wird, kann dessen Einfluss auf das Modellergebnis geprüft werden. Eine Mitimplementierung dieses Prozesses vergrößert aber die Unsicherheiten im Modellergebnis, da die - meistens zusätzlichen - Parameter, die man zum Modellieren dieses Prozesses benötigt, wiederum mit Fehlern behaftet sind.

Der Aufwand einer Anpassung der Modelle *SimpleBox2.0* und 1.0 an Fragestellung als auch an die regionalspezifische Datenlage ist folglich als so hoch einzuschätzen, dass eine Neuprogrammierung empfohlen wird. Für eine größtmögliche Flexibilität des Modells, wäre die Programmierung in Excel günstig. Die Durchführung einer Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalyse via Monte Carlo Add-In sollte vorbereitet sein. Bezüglich der Aufnahme von Abschätzungsalgorithmen sollte gelten: *So einfach wie möglich, so komplex wie nötig* [Prof. LeRoy F. Johnson, University of New Brunswick, Canada].

6 Anhang

Benzol in BW						
Programm	CemoS Level2	Chem- CAN	HAZCHE M	Simple- Box2.0	EUSES	CalTOX
Sediment	1	5,63	2,77	1	1	26,03
Boden	90,11	92	48,69	146,88	748,08	36,79
Wasser	13,34	625	296,14	356	224	945,53
Luft	23.926,36	23.878,00	23.265,58	9.190,00	9.190,00	12.429,91
Ge- samtgehalt	24.031,34	24.601,00	23.613,23	9.692,88	10.162,08	13.439,35
Chloroform in BW						
Sediment	1	1	1	1	1	3,95
Boden	10,52	14,7	9,53	567,2	70,44	73,41
Wasser	3,07	86,1	44,15	61,7	50	194,67
Luft	4.889,43	4.884,00	5.056,67	3.090,90	2.310,00	6.325,85
Ge- samtgehalt	4.903,25	4.985,00	5.110,78	3.718,90	2.430,44	6.598,37
SDS in BW						
Sediment	11,28	4,31	172,67	1	1	83,8
Boden	5.453,66	5.281,00	597,04	11.983,00	11.985,00	30.418,43
Wasser	45,68	104	4.416,34	2.550,00	124	122,97
Luft	1	1	1	1	1	6,79
Ge- samtgehalt	5.512,20	5.389,00	5.200,44	14.533,02	12.109,01	30.639,78
Lindan in BW						
Sediment	59,93	28,4	17,82	1,13	1,19	302,92
Boden	6.943,91	39.807,00	40.950,34	40.457,10	40.329,54	48.458,15
Wasser	92,78	78,6	44,14	62,9	47,9	314,88
Luft	44,29	20,5	21,36	1	1,15	30,07
Ge- samtgehalt	7.245,65	39.934,00	41.033,93	40.522,07	40.378,78	49.373,60
Fortsetzung s. nächste Seite						

Tab.24: Vergleich der berechneten Lasten (in kg) aller Modellsubstanzen für die Hauptkompartimente der Modellregion Baden-Württemberg bei Verwendung aller in dieser Studie untersuchten Verteilungsmodelle. Lasten < 1 kg (grauer Hintergrund) wurden für die logarithmische Darstellung auf 1 kg gesetzt. (Hinweis: Die Werte erheben keinerlei Anspruch tatsächliche Verhältnisse wiederzugeben!)

Glyphosat in BW						
Programm	CemoS Level2	Chem- CAN	HAZCHE M	Simple- Box2.0	EUSES	CalTOX
Sediment	214,12	56,8	48,48	1	1	3.626,80
Boden	196.425,5 1	2,05E+05	206.605,7 0	206.190,0 0	206.570,6 6	984.893,7 1
Wasser	126,34	32,8	25,29	62,4	46,18	451,08
Luft	1	13,3	1	1	1	1
Ge- samtgehalt	196.769,7 2	2,05E+05	206.680,6 0	206.252,4 0	206.616,8 0	988.987,5 3

Tab.24: Vergleich der berechneten Lasten (in kg) aller Modellsubstanzen für die Hauptkompartimente der Modellregion Baden-Württemberg bei Verwendung aller in dieser Studie untersuchten Verteilungsmodelle (Fortsetzung)

7 Literaturverzeichnis

Atkins, P. W. (1988). *Physikalische Chemie*. VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim.

Backhaus, K., Erichson, B., Plinke, W., Schuchard-Fischer, C., und Weiber R. (1989). *Multivariate Analysenmethoden*. Springer Verlag Berlin Heidelberg New York London Paris Tokyo.

Beratergremium für umweltrelevante Altstoffe BUA (1985): *BUA-Stoffbericht 1. Chloroform*. S. Hirzel Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft, Stuttgart.

Beratergremium für umweltrelevante Altstoffe BUA (1996). *BUA-Stoffbericht 189. Fettalkoholsulfate*. S. Hirzel Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft, Stuttgart.

Berding, V., Schwartz, S., und Matthies, M. (2000). EU Risk Assessment Guidelines, Part III: Scenario Analysis of a Level III Multimedia Model Using Generic and Regional Data. *Environ. Sci. & Pollut. Res.* 7 (2):147-158.

Bias, W.-R. (1996). Risikobewertung von Stoffen in der Konzeption der EU. In Behret, H. und Nagel, R., *Chemikalienbewertung in der Europäischen Union; Konzepte für den terrestrischen Bereich*. GDCh-Monographie, Bd. 5, S. 9. Gesellschaft Deutscher Chemiker, Frankfurt.

Brandes, L.J., den Hollander, H., und van de Meent, D. (1996). *SimpleBox 2.0: a nested multimedia fate model for evaluating the environmental fate of chemicals*. RIVM Report no. 719101029. National Institute of Health and the Environment (RIVM), P.O. Box 1, 3720 BA Bilthoven, the Netherlands.

Brüggemann, R. (1986). *Mackays Fugazitätsmodell mit Level I bis Level IV - Parameter, Kompartimentalisierung, Sensitivität*. GSF-Bericht 43/86.

Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (1998). *Umweltpolitik, Wasserwirtschaft in Deutschland*. Bundesumweltministerium.

Central Intelligence Agency CIA (1999). *The World Factbook 1999*. Washington DC. Im Internet abrufbar unter <http://www.odci.gov/cia/publications/factbook/geos/gm.html>

Clements, R.G., Nabholz, J.V., Johnson, D.W., und Zeeman, M. (1993). The use and application of QSARs in the Office of Toxic Substances for ecological hazard assessment of new chemical. In Landis, W.G., Hughes, J.S., und Lewis, M.A. (eds.). *Environmental Toxicology and Risk Assessment*. ASTM, Philadelphia, PA; Atlantic City, NJ, pp. 56-64.

EC (1996): Technical Guidance Document in Support of Commission Directive 93/67/EEC on Risk Assessment for New Notified Substances and Commission Regulation (EC) No 1488/94 on Risk Assessment for Existing Substances, Part I-IV. Luxembourg, Office for Official Publications of the European Communities.

ECETOC (1994a) Special Report No. 8. *HAZCHEM - A Mathematical Model for Use in Risk Assessment*. European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals, Brussels, Belgium.

ECETOC (1994b). Technical Report No. 58. *Assessment of Non-Occupational Exposure to Chemicals*. European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals, Brussels, Belgium.

EEC (1992): *Council Directive 92/32/EEC of 30 April 1992 amending for the 7th time Council Directive 67/548/EEC on the approximation of laws, regulations and administrative provisions relating to the classification, packaging and labelling of substances ("7th Amendment")*. Off. J. of the European Communities L 154/1.

EEC (1993a). *Council Regulation (EEC) No. 793/93 of 23 March 1993 on the evaluation and control of the risks of existing substances*. Off. J. of the European Communities L 84/1.

EEC (1993b). *Commission Directive 93/67/EEC of 20 July 1993 laying down the principles for assessment of risks to man and the environment of substances notified in accordance with Council Directive 67/548/EEC*. Off. J. of the European Communities L 227/9.

EEC (1994). *Commission Regulation (EC) No 1488/94 of 28 June 1994 laying down the principles for assessment of risks to man and the environment of existing substances in accordance with Council Regulation (EEC) No. 793/93*. Off. J. of the European Communities L 161/3.

Encyclopaedia Britannica-online. Im Internet abrufbar unter:
<http://www.britannica.com>

Feijtel, T.C.J., Boeije, G., Matthies, M., Young, A., Morris, G., Gandolfi, C., Hansen, B., Fox, K., Holt, M., und Koch, V. (1997). Development of a Geography-Referenced Regional Exposure Assessment Tool for European Rivers - GREAT-ER. Contribution to GREAT-ER #1. *Chemosphere*, 34(11):2351-2373.

Hulpke, H., Koch, H.A., und Wagner, R. (1993). *Römpp Lexikon. Band Umwelt*. Thieme Verlag Stuttgart.

Jacobs, C.M.J., und van Pul, W.A.J. (1996). *Long-range Atmospheric Transport of Persistent Organic Pollutants, I: Description of surface-atmosphere exchange modules and implementation in EUROS*. RIVM Report no. 722401013. National Institute of Health and the Environment (RIVM), P.O. Box 1, 3720 BA Bilthoven, the Netherlands.

Jager, T. (ed.). Evaluation of EUSES: inventory of experiences and validation activities. RIVM report 679102048, October 1998. National Institute of Health and the Environment (RIVM), P.O. Box 1, 3720 BA Bilthoven, the Netherlands.

Jost, D. (1997). *Die neue TA Luft* (Loseblattsammlung). WEKA Fachverlag für technische Führungskräfte GmbH, Augsburg, Stand Dezember 1997.

Landesanstalt für Umweltschutz LfU (1979). *Umweltqualitätsbericht Baden-Württemberg*. Stuttgart.

Landesanstalt für Umweltschutz LfU (1992). *Chemische Untersuchungen des Wassers und der Sedimente von 44 Seen in Baden-Württemberg*. Wasserwirtschaftsverwaltung, Heft 28. Umweltministerium Baden-Württemberg, Stuttgart.

Landesanstalt für Umweltschutz LfU (1993). *Jahresbericht 1993*. Karlsruhe.

Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg LfU (1999). *Ökologische Umweltbeobachtung I, Wirkungen von Emissionen des Kfz-Verkehrs auf Pflanzen und die Umwelt - Literaturstudie*. Karlsruhe.

Lange, J. (1995). *Alternative Lösungsansätze für eine nachhaltige Abwasserentsorgung*. Gutachten der Arbeitsgemeinschaft Technologietransfer, Umweltschutz, Raumplanung und Stadtökologie (ATURUS) für die Akademie für Technikfolgenabschätzung in Baden-Württemberg. Freiburg. (Unveröffentlicht)

Lehn, H., Steiner, M., und Mohr, H. (1996). *Wasser - die elementare Ressource. Leitlinien einer nachhaltigen Nutzung*. Springer Verlag Berlin Heidelberg.

Mackay D. (1991). *Multimedia Environmental Models: The Fugacity Approach*. Lewis Publishers, Chelsea, MI.

Mackay D., und Paterson S. (1981). Calculating Fugacity. *Environmental Science & Technology*, 15:1006-1014.

Mackay, D., Paterson, S., und Schroeder, W.H. (1986). Model Describing the Rates of Transfer Processes of Organic Chemicals between Atmosphere and Water. *Environmental Science & Technology*, Vol. 20, No. 8.

Mackay, D., und Diamond, M. (1989). Application of the QWASI (Quantitative Water Air Sediment Interaction) fugacity model to the dynamics of organic and inorganic chemicals in lakes. *Chemosphere* 18:1343-1365.

Mackay, D., und Paterson, S. (1991). Evaluating the Multimedia Fate of Organic Chemicals: A Level III Fugacity Model. *Environmental Science & Technology*, 25:427-436.

Mackay, D., Shiu, W.Y., und Ma, K. C. (1991). *Illustrated Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, Vol. I*. Lewis Publishers, Chelsea, MI. S. 142 ff.

Mackay, D., Shiu, W.Y., und Ma, K. C. (1992). *Illustrated Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals, Vol. III*. Lewis Publishers, Chelsea, MI. S.625.

Mackay D., Paterson S., und Shiu W.Y. (1992a). Generic Models for Evaluating the Regional Fate of Chemicals. *Chemosphere* 24:695-717.

Mackay, D., Paterson, S., Kicsi, G., Di Guardo, A., und Cowan, C.E. (1996a). Assessing the Fate of New and Existing Chemicals: A Five Stage Process. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 15(9):1618-1626.

Mackay, D., Paterson, S., Di Guardo, A., und Cowan, C.E. (1996b). Evaluating the Environmental Fate of a Variety of Types of Chemicals using the EQC Model. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 15(9):1627-1637.

Mackay D., Di Guardo A., Paterson S., Kicsi G., Cowan C.E., Kane D.M. (1996c) Assessment of Chemical Fate in the Environment Using Evaluative, Regional and Local-Scale Models: Illustrative Application to Chlorobenzene and Linear Alkylbenzene Sulfonates. *Environmental Toxicology and Chemistry* 15(9):1638-1648

Mackay, D., Shiu, W.Y., und Ma, K.C. (1997). *Illustrated Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals*, Vol. V. Lewis Publishers, Chelsea, MI.

MacLead, M., und Mackay, D. (1999). An Assessment of the Environmental fate and Exposure of Benzene and the Chlorobenzenes in Canada. *Chemosphere*, 38(8):1777-1796.

McKone, T.E., Hall d., und Kastenber W.E. (March 1997). CalTOX Version 2.3, Description of Modifications and Revisions. Funded by: The Office of Environmental Health Hazard Assessment. California Environmental Protection Agency. Sacramento, California.

Im Internet abrufbar unter: http://www.cwo.com/~herd1/ftp/mod2_3.pdf

OECD (1982) *Hazard Assessment Project*. Step Systems Group: Final Report. Stockholm.

OECD (1994), US EPA and EC Joint Project on the Evaluation of (Quantitative) Structure-activity Relationships. No. 88. *OECD Environmental Monograph*. OECD, Paris.

Paterson, S., und Mackay, D. (1985). The Fugacity Concept in Environmental Modelling. In Hutzinger, O. (Ed.), *Handbook of Environmental Chemistry*, Vol. 2/C. Springer Verlag Berlin Heidelberg. S. 121-140.

Paterson, S., Mackay, D., und McFarlane, C. (1994). A Model of Organic Chemical Uptake By Plants From Soil and the Atmosphere. *Environ. Sci. Technol.* 28, 2259-2266.

Pratt, G., Gerbec, P.E., Livingston, S.K., Oliaei, F., Bollweg, G.L., Paterson, S., und Mackay, D. (1993). An Indexing System for Comparing Toxic Air Pollutants Based Upon Their Potential Environmental Impacts. *Chemosphere* 27(8):1359-1379.

Renner, R. (1995). Predicting Chemical Risks with Multimedia Fate Models. *Environmental Science & Technology*, 29(12A):557-559.

SETAC - EUROPE NEWS (1999). Society of Environmental Toxicology and Chemistry, SETAC-Europe, Brussels, Belgium. Volume 10, issue 3, May 1999, S. 7.

Severinsen, M., Andersen, M.B., Chen, F., und Nyholm, N. (1996). A Regional Chemical Fate and Exposure Model Suitable for Denmark and Its Coastal Sea. *Chemosphere* 32(11):2159-2175.

SLA 1994a, Statistisches Landesamt Baden-Württemberg (Hrsg.): *Beseitigung und Verwertung von Klärschlamm 1991*. Statistische Berichte Baden-Württemberg - Umwelt. Artikel-Nr. 361391994 vom 08.10.1993.

SLA 1994b, Statistisches Landesamt Baden-Württemberg (Hrsg.): *Kommunales Abfallaufkommen in den Stadt- und Landkreisen Baden-Württembergs 1993*. Statistische Berichte Baden-Württemberg - Umwelt. Artikel-Nr. 361693001 vom 15.12.1994.

SLA 1994c, Statistisches Landesamt Baden-Württemberg (Hrsg.): *Öffentliche Abwasserbeseitigung in Baden-Württemberg 1991 - kommunale Kläranlagen*. Statistische Berichte Baden-Württemberg - Umwelt. Artikel-Nr. 361391011 vom 29.12.1994.

Statistisches Bundesamt, Wiesbaden (1997). *Statistisches Jahrbuch 1997 für die Bundesrepublik Deutschland*. Metzler-Poeschel Verlag, Stuttgart.

Statistisches Landesamt Baden-Württemberg (1996). *Statistisches Taschenbuch 1996*. Metzler-Poeschel Verlag, Stuttgart.

Trapp, S., und Matthies, M. (1996). *Dynamik von Schadstoffen - Umweltmodellierung mit CemoS: Eine Einführung*. Springer Verlag Berlin Heidelberg.

Trapp, S. und Schwartz, S. (1999). Proposals to Overcome Limitations in the EU Chemical Risk Assessment Scheme. *Chemosphere*, 41(7):965-971.

Umweltbundesamt (1998). *Umweltdaten Deutschland 1998*. Erich Schmidt Verlag GmbH & Co. Berlin. S. 36.

Urhahn, T., und Ballschmiter, K. (1998). Chemistry of the Biosynthesis of Halogenated Methanes: C1-Organohalogenes as Pre-Industrial Chemical Stressors in the Environment? *Chemosphere* 37(6):1017-1032.

Van Jaarsveld, J.A. (1995). *Modelling the long-term atmospheric behaviour of pollutants on various spatial scales*. RIVM Report no. 722501005. National Institute of Health and the Environment (RIVM), P.O. Box 1, 3720 BA Bilthoven, the Netherlands.

Van Jaarsveld, J.A., van Pul, W.A.J., und De Leeuw, F.A.A.M. (1997). Modelling Transport and Deposition of Persistent Organic Pollutants in the European Region. *Atmospheric Environment*, 31(7):1011-1024.

Van Leeuwen, C.J., und Hermens, J.L.M. (1995). *Risk Assessment of Chemicals: an introduction*. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers.

Verbruggen, E., Van de Meent, D., Beusen, A.H.W., und den Hollander, A. (1997). *GLOBETOX Modelling the global fate of micropollutants*. RIVM Report no. 461502014. National Institute of Health and the Environment (RIVM), P.O. Box 1, 3720 BA Bilthoven, The Netherlands.

VROM (1989). *National Environmental Policy Plan 1990-94*. To choose or to lose. Second Chamber of the States General 1988-1989, 21 137, nrs. 1-2. The Hague, Ministry of Housing, Physical planning and the Environment. VROM 90334/7-89.

Wania, F., und Mackay, D. A (1995). Global Distribution Model for Persistent Organic Chemicals. *The Science of the Total Environment*, 160/161:211-232.

Wiedmann T., Güthner B., Class T.J., Ballschmiter K. (1994) Global Distribution of Tetrachloroethene in the Troposphere: Measurements and Modeling. *Environmental Science & Technology* 28:2321-2329.

Wormer, H. (1995). *Modellierung globaler Schadstoffflüsse*. Diplomarbeit, Mai 1995. Universität Ulm, Abteilung Analytische Chemie und Umweltchemie.