

# ***REMODE***

## **Ein regionales Verteilungsmodell für ausgewählte Emissionen in Baden-Württemberg**

B. Märker, M. Eckerle, C. Dreisbusch,  
K. Ballschmiter

**Nr. 186 / März 2001**

**Arbeitsbericht**

ISBN 3-934629-38-5

ISSN 0945-9553

***Akademie für Technikfolgenabschätzung  
in Baden-Württemberg***

Industriestr. 5, 70565 Stuttgart  
Tel.: 0711 • 9063-0, Fax: 0711 • 9063-299  
E-Mail: [info@ta-akademie.de](mailto:info@ta-akademie.de)  
Internet: <http://www.ta-akademie.de>

Die *Akademie für Technikfolgenabschätzung in Baden-Württemberg* gibt in loser Folge Aufsätze und Vorträge von Mitarbeitern sowie ausgewählte Zwischen- und Abschlussberichte von durchgeführten Forschungsprojekten als *Arbeitsberichte der TA-Akademie* heraus. Diese Reihe hat das Ziel, der jeweils interessierten Fachöffentlichkeit und dem breiten Publikum Gelegenheit zu kritischer Würdigung und Begleitung der Arbeit der TA-Akademie zu geben. Anregungen und Kommentare zu den publizierten Arbeiten sind deshalb jederzeit willkommen.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Die Entwicklung von REMODE	2
1.2	Zum Aufbau dieses Arbeitsberichts	4
<b>2</b>	<b>Modelltheorie</b>	<b>5</b>
2.1	Grundlagen	5
2.1.1	Level I	5
2.1.2	Level II	6
2.1.3	Level III	7
2.2	Das Fugazitätskonzept	8
<b>3</b>	<b>Die Basisgleichungen in REMODE</b>	<b>12</b>
3.1	Kompartimente und Fugazitätskapazitäten	13
3.1.1	Hauptkompartiment Luft $Z_{b1}$	13
3.1.2	Hauptkompartiment Wasser $Z_{b2}$	14
3.1.3	Hauptkompartimente Boden $Z_{b3}$ und Ackerboden $Z_{b4}$	15
3.1.4	Hauptkompartiment Sediment $Z_{b5}$	16
3.2	Transferraten	17
3.2.1	Luft $\leftrightarrow$ Wasser ( $D_1 \rightarrow_2$ und $D_2 \rightarrow_1$ )	17
3.2.2	Luft $\leftrightarrow$ Boden bzw. Luft $\leftrightarrow$ Ackerboden	19
3.2.3	Wasser $\leftrightarrow$ Sediment	21
3.2.4	Boden $\leftrightarrow$ Wasser bzw. Ackerboden $\leftrightarrow$ Wasser	22
3.3	Gewinne und Verluste	22
3.3.1	Emissionen und Hintergrundeinträge	22
3.3.2	Advektiver Austrag und Abbau	24
3.4	Stoffmengenbilanz	25
<b>4</b>	<b>Detaillierte Beschreibung der Eingabedaten</b>	<b>29</b>
4.1	Zum Aufbau der Datei Remode.xls	29
4.1.1	„Eingabe“	29
4.1.2	„Flussdiagramm“	30
4.2	Substanzspezifische Parameter	30
4.2.1	Abbauraten	31
4.2.2	Physikalisch-chemische Parameter	31
4.2.3	Emissionen und Hintergrundeinträge	34

4.3	Regionalspezifische Parameter	35
5	<i>Modellierung des Verhaltens in eine biologischen Kläranlage</i>	43
5.1	Allgemeines Vorgehen	43
5.2	Auswertung von Testergebnissen zur Bioabbaubarkeit eines Stoffes aus der Fachliteratur	48
5.3	Detaillierte Beschreibung der im Kläranlagenmodell enthaltenen Parameter	50
6	<i>Anhang</i>	54
6.1	Tipps zum Modellieren von Emissionsszenarien in REMODE	54
7	<i>Literaturverzeichnis</i>	56

## Zusammenfassung

Dieser Arbeitsbericht beschreibt die technischen Details des regionalen Verteilungsmodells REMODE. REMODE ist im Rahmen des TA-Projektes „Lokale, regionale und globale Verteilungsmodelle für Schadstoffe“ entwickelt worden und soll als Werkzeug dienen, die Ableitung von Reduktionsstrategien für Emissionen aus der Land- und Forstwirtschaft sowie dem Straßenverkehr zu unterstützen. Das Werkzeug sollte ein Computermodell sein, das wissenschaftlich plausibel und nachvollziehbar ist. Zugleich sollte es auf eine möglichst große Zahl an Chemikalien anwendbar sein und vergleichbare Ergebnisse liefern.

Die Entscheidung der Autoren fiel auf ein Expositionsmodell, das sich im Wesentlichen aus dem regionalen Expositionsmodell der EU-Risikobewertung für alte und neue Stoffe, SimpleBox 1.0 [Brandes et al., 1996] ableitet, da dieses die oben genannten Kriterien erfüllt.

REMODE ist ein Level III-Multimedia-Kompartimentmodell (auch: Mackay-Modell oder Fugazitätsmodell) [Mackay, 1991]. Solche Modelle betonen die Übergänge eines Stoffes zwischen verschiedenen Umweltmedien, die als eigenständige thermodynamische Phasen betrachtet werden. Außerdem werden die chemisch-biologischen Umwandlungen (Abbauprozesse) der Stoffe modelliert. Dabei bilden sog. Kompartimente, in welche die Umwelt aufgeteilt wird (in REMODE: Luft, Wasser, Sediment, zwei Bodenkompimente), die kleinsten räumlichen Einheiten einer Region. An den Grenzflächen dieser Kompartimente (oder Phasen) finden die bestimmenden Austauschprozesse statt. Innerhalb der Kompartimente wird von einem idealisierten, thermodynamischen Zustand der Gleichverteilung ausgegangen. Als Input werden Emissions-, Transport- und Transformationsdaten benötigt. Das Modell berechnet daraus Konzentrationen in den Umweltmedien für einen Fließgleichgewichtszustand (Steady-State). Die Grundeinstellungen in REMODE wurden so gewählt, dass sie die Region Baden-Württembergs repräsentieren.

Es muss betont werden, dass REMODE nicht mit den Angaben im Technischen Leitfaden zur Risikobewertung von Chemikalien (TGDs) [EC, 1996] übereinstimmt. Die Hauptursache für diesbezüglich vorgenommene Modifikationen liegt im Bemühen der Autoren begründet, eine größtmögliche Anpassung an die regionalspezifische Datenlage in Baden-Württemberg, sowie eine optimale Transparenz im Modellansatz zu erreichen. Ferner wurde die Voraussetzung zur Durchführung einer probabilistischen Expositionsmodellierung geschaffen. Somit sind Sensitivitätsanalysen leicht ausführbar, um einerseits zu klären, an welcher Stelle auch ungenauere Daten nützliche Ergebnisse liefern können, und andererseits, für welche Parameter besonders sorgfältig Messwerte oder Abschätzfunktionen ausgewählt werden müssen.

Dieser Arbeitsbericht ist als technische Dokumentation des Modells REMODE gedacht. Die Spreadsheet-Datei (Microsoft EXCEL) des Modells Remode.xls kann kostenlos

über die Homepage der TA-Akademie heruntergeladen werden unter <http://www.ta-akademie.de/pub.asp> .

(Die Datei einschließlich weiterer Hinweise zum download findet sich unter der Nummer und/oder dem Titel dieses Arbeitsberichtes).

# 1 Einleitung

Um Transport und Verbleib von Chemikalien abschätzen zu können werden u.a. aus Zeit- und Kostengründen zunehmend Computermodelle eingesetzt. Solche Computermodelle sind bisher nicht in der Lage Ökosysteme differenziert und damit realistisch abzubilden. Trotzdem können mit Ihrer Hilfe in vielen Fällen spezifische Frage- und Aufgabenstellungen mituntersucht und bearbeitet werden. Eine solche Aufgabe stellt z.B. die Entwicklung von Reduktions- und Vermeidungsstrategien für Emissionen dar, da Eintrags Szenarien in ihren Auswirkungen voraus berechnet werden können.

Auf der Suche nach einem Werkzeug, das die Ableitung von Reduktions- und Vermeidungsstrategien für Emissionen aus der Land- und Forstwirtschaft, sowie dem Straßenverkehr unterstützen könnte, wurde an der TA-Akademie in Form eines Pilotprojektes „Regionale Verteilungsmodelle für Chemikalien im Vergleich“ untersucht, welche Computermodelle zur Exposition von Chemikalien weltweit im wissenschaftlichen Diskurs stehen, in Regularien Anwendung gefunden haben bzw. in Behörden im Einsatz sind [Märker et al., 2000]. Es zeigte sich, dass die benutzten Modelle je nach ihrer Zielvorgabe in zwei Gruppen eingeteilt werden können. Werden für Immissionsschutz- und luftreinhaltungsrechtliche Maßnahmenabschätzungen in der Regel hauptsächlich Ausbreitungsmodelle mit hoher zeitlicher wie räumlicher Auflösung verwendet, so kommen bei Chemikalienbewertungen, in denen ein einzelner Stoff im Mittelpunkt steht, überwiegend Verteilungsmodelle, sog. Multimedia-Kompartimentmodelle wie SimpleBox 1.0 oder CalTOX zum Einsatz. Das Programm SimpleBox 1.0 ist Bestandteil der EU-Risikobewertung für alte und neue Stoffe. Das Programm CalTOX unterstützt in den USA die Bewertung von gesundheitlichen Risiken, die durch Bodenaltlasten entstehen können [ebd.].

Um das gesuchte Werkzeug somit auf möglichst viele Fragestellungen anwenden zu können, wurden daraufhin allein solche Verteilungsmodelle miteinander verglichen, die geeignet sein könnten, den Verbleib ausgewählter Emissionen im regionalen Rahmen Baden-Württembergs (z.B. aus der Land- und Forstwirtschaft) abzuschätzen.

Von den Autoren wurde letztlich eine Neuprogrammierung auf Basis der regionalen Expositionsmodellierung in der EU-Risikobewertung von alten und neuen Stoffen umgesetzt, so war eine größtmögliche Anpassung an die regionalspezifische Datenlage in Baden-Württemberg möglich. Auf die Notwendigkeit umfangreicher Sensitivitätsanalysen sei nachdrücklich hingewiesen. Einerseits ist so zu klären, an welcher Stelle auch ungenauere Daten nützliche Ergebnisse liefern können, andererseits wird deutlich, für welche Parameter besonders sorgfältig Messwerte

oder Abschätzfunktionen ausgewählt werden müssen. Dazu ist es zudem notwendig, die Durchführung einer probabilistischen Expositionsmodellierung im Modell vorzusehen.

Aus den genannten Gründen wurde von den Autoren die Programmierung von REMODE (REgional MODEL) in Microsoft EXCEL durchgeführt. Das Tabellenkalkulationsprogramm Excel ist weit verbreitet und ermöglicht eine Mackay Level III Programmierung. Darüber hinaus lässt sich über kommerziell erhältliche Monte Carlo Simulationsprogramme in Form sog. Add-Ins<sup>1</sup> eine probabilistische Expositionsmodellierung leicht umsetzen.

## 1.1 Die Entwicklung von REMODE

Ausgangspunkt der Neuprogrammierung von REMODE war die detaillierte Beschreibung einer Level-III-Modellierung in Mackay, 1991. In dieser Veröffentlichung werden für sechs Substanzen Expositionsmodellierungen durchgeführt und dokumentiert. Zielgebiet ist dabei die Region Süd-Ontario in Kanada. Die Dokumentation enthält zum Teil Ergebnisse für die einzelnen Transferprozesse, was für die Fehlersuche von großem Vorteil war.

Für den mathematischen Formalismus wurde die Idee von Brüggemann [Brüggemann, 1986] aufgegriffen die Matrizenschreibweise zu benutzen. Dies erlaubt die Komplexität der benutzten Gleichungen für die Stoffmengenbilanzen in der vorliegenden Dokumentation, im Gegensatz zu denen einer analytischen Lösung, wesentlich zu verringern (s. Kap. 3.4).

Für die Modellierung des Einflusses von biologischen Kläranlagen wurden die in den Technical Guidance Documents (TGDs) [EC, 1996] tabellarisch veröffentlichten Ergebnisse des Kläranlagenmodells SimpleTreat 3.0 [Struijs, 1996] verwendet. Eine größere Gruppe von Abschätzfunktionen wurde aus dem RIVM Report für SimpleBox 2.0 [Brandes et al., 1996] benutzt.

Größte Aufmerksamkeit wurde von den Autoren auf die Suche und Auswahl der einzelnen Eingabewerte bei den regionalspezifischen Parametern gelegt. Alle hierfür benutzten Quellen werden in den Kapiteln 4.3 und 4.4 genannt. Abschätzungen, die ausschließlich von den Autoren selbst vorgenommen wurden, sind als solche gekennzeichnet.

---

<sup>1</sup> Z.B. @Risk™ oder Crystal Ball™.



Zuletzt möchten die Autoren die Hoffnung aussprechen, dass sie mit REMODE ein nützliches Werkzeug für die Modellierung von Expositionen im regionalen Bereich erstellt haben<sup>2</sup>.

Das Programm REMODE kann kostenlos über die Homepage der TA-Akademie als Excel-Datei Remode.xls unter <http://www.ta-akademie.de/pub.asp> heruntergeladen werden.

(Die Datei einschließlich weiterer Hinweise zum download findet sich unter der Nummer und/oder dem Titel dieses Arbeitsberichtes).

---

<sup>2</sup> Vgl. „All models are wrong but some are useful.“ George E. P. Box, (1979) in: Robustness in the strategy of scientific model building. In R.L. Launer, and G.N. Wilkinson, (eds.) Robustness in Statistics. New York: Academic Press

## **1.2 Zum Aufbau dieses Arbeitsberichts**

Im Kapitel 2 wird eine grundsätzliche Einführung in Fugazitätsmodelle gegeben, die den Leser mit den wichtigsten Gleichungen vertraut machen soll.

Im anschließenden Kapitel 3 werden nahezu lückenlos alle Gleichungen systematisch vorgestellt, die in REMODE benutzt werden.

Kapitel 4.2 stellt die für den Anwender besonders wichtigen substanzspezifischen Parameter in der Reihenfolge ihres Auftretens im REMODE EXCEL-Datenblatt einzeln vor und enthält zusätzliche Anwenderhinweise.

In Kapitel 4.3 werden die Quellen für die benutzten regionalspezifischen Parameter offen gelegt.

Ein Sonderkapitel informiert über die Nutzung des Kläranlagenmodells (Kap.4.4).

Dieser Arbeitsbericht ist als technische Dokumentation des Modells REMODE gedacht.

## 2 Modelltheorie

### 2.1 Grundlagen

Mackay und Paterson stellten 1981 eine Hierarchie der Kompartimentmodelle mit verschiedenen sog. *Levels* auf, wobei die Betrachtung der Verteilungs- und Transformationsvorgänge mit steigendem *Level* zunehmend verfeinert wird, was allerdings auch mit zunehmenden Anforderungen an die Datenversorgung verbunden ist<sup>3</sup> [Mackay und Paterson, 1981].

#### 2.1.1 Level I

Zur Verdeutlichung der Prozesse in *Multimedia-Kompartimentmodellen* ist das Prinzip der kommunizierenden Röhren eine anschauliche Hilfe:

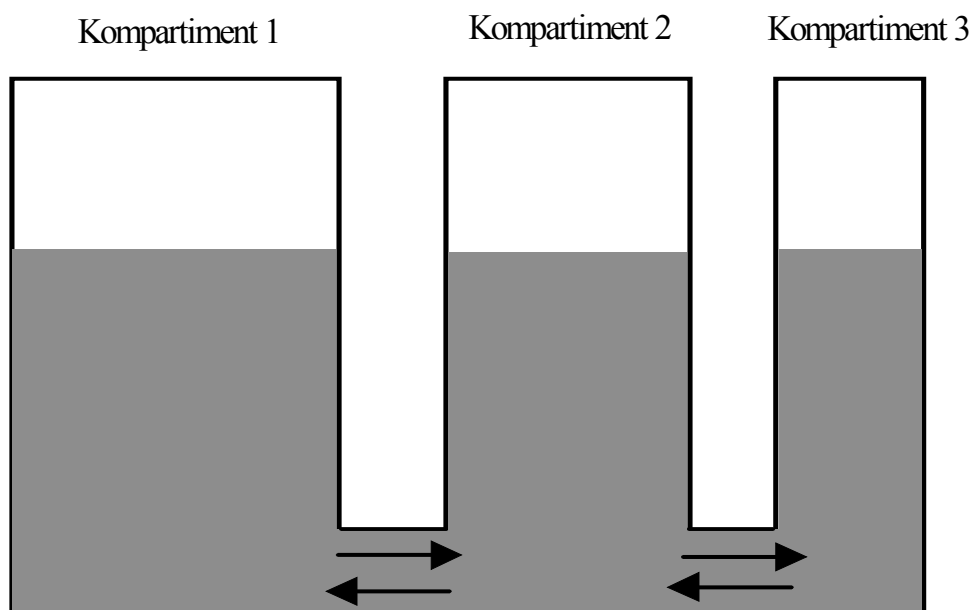


Abb. 1: Verteilungsgleichgewicht zwischen allen Kompartimenten in Level I

---

<sup>3</sup> Mackay unterscheidet insgesamt vier Levels. Für das Verständnis von REMODE ist die Kenntnis der Level I bis III ausreichend. Für Informationen zu Level IV s. z.B. [Märker et al., 2000].

Eine vorgegebene Stoffmenge verteilt sich gleichmäßig auf alle Kompartimente des Systems. Es gilt ein strenges Gleichgewicht, d.h. nach einem einmaligen Eintrag wird nichts von der Chemikalie dem System weiter hinzugefügt oder aus ihm herausgenommen, und zeitliche Abhängigkeiten spielen keine Rolle. Der Stoff wird als stabil betrachtet. Das Volumen der Röhren im Bild ist ein Maß für ihre Fähigkeit, eine bestimmte Menge der Chemikalie aufzunehmen, und ergibt sich aus den Eigenschaften der Chemikalie und des Kompartiments - in diesem einfachen Fall aus dem Volumen des Kompartiments und dem Verteilungskoeffizienten der Chemikalie zwischen den Kompartimenten. Sind diese Daten alle bekannt, so ergibt sich die Konzentration der Substanz in den einzelnen Kompartimenten im Gleichgewicht unter Anwendung der Massenerhaltung aus einem einfachen Gleichungssystem.

Ein Level-I-Modell benötigt relativ wenig Daten und liefert ein Bild davon, wohin sich eine Substanz in der Umwelt tendenziell bewegen wird. Man erhält z.B. Aussagen darüber ob die Atmosphäre, die Ozeane oder der Boden bevorzugte Kompartimente für den betrachteten Stoff sind.

### 2.1.2 Level II

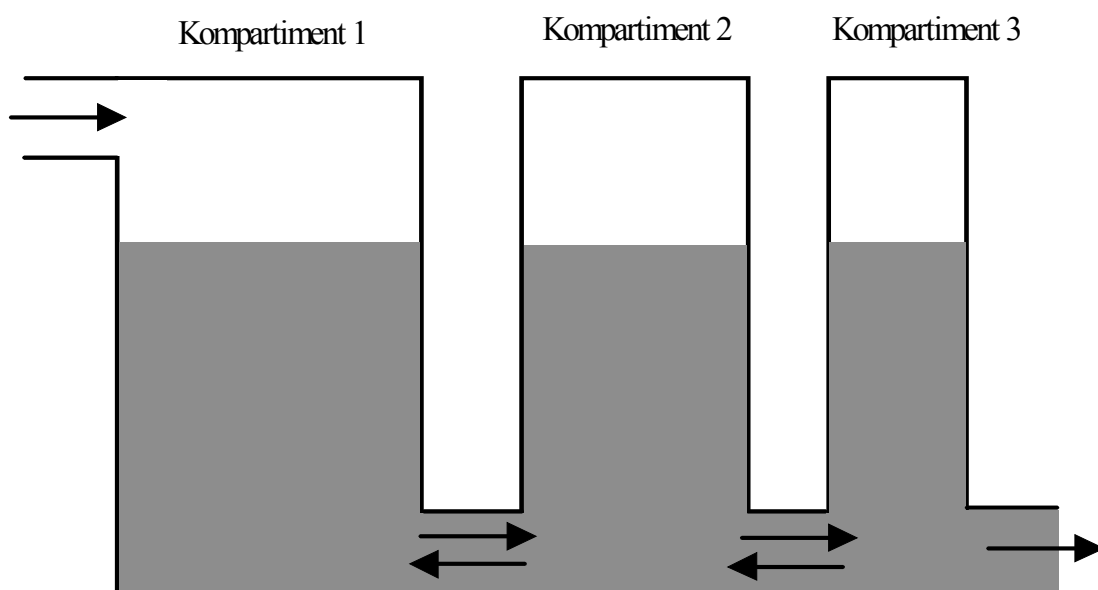


Abb.2: Fließ- und Verteilungsgleichgewicht zwischen allen Kompartimenten in Level II

In Stufe II wird ein Fließgleichgewicht angenommen in Bezug auf den Zutritt der Chemikalie aus der Technosphäre in die Modellwelt und ihrem Abbau durch chemische Senken sowie Abtransport durch Advektion (Wind, Wasser). Es stellt sich ein stationärer Zustand ein. Bezüglich der Verteilung der Chemikalie auf die Kompartimente wird aber ein Gleichgewicht angenommen, d.h. die

Transferreaktionen zwischen den Kompartimenten werden als wesentlich schneller als die Abbaureaktionen betrachtet. Mit solch einem Level-II-Szenario erhält man als wesentliche Information Angaben über den Umfang des Abbaus in den verschiedenen Kompartimenten. So kann festgestellt werden, wo die Gefahr der Anreicherung einer Chemikalie bei kontinuierlichem Eintrag besteht und wo sie infolge ihres Abbaus und Verteilungsverhaltens eher nicht zu finden sein wird.

### 2.1.3 Level III

Ab dieser Stufe wird die Annahme der momentanen Einstellung von Verteilungsgleichgewichten zwischen den Kompartimenten aufgegeben. Die Annahme des Fließgleichgewichtes, wie in Level II, wird dagegen beibehalten. Dies wird dadurch erreicht, dass in das Modell Transferwiderstände (über sog. *Transferraten*) zwischen den Kompartimenten aufgenommen werden, die einen *freien* Austausch (= nach rein thermodynamischen Gesetzmäßigkeiten) unterdrücken, d.h. ab dieser Stufe ist es möglich, dass die Transferreaktionen zwischen den Kompartimenten langsamer erfolgen als die Abbaureaktionen in den Kompartimenten. Dadurch ist es nicht mehr gleichgültig, über welche Kompartimente Ein- oder Austräge erfolgen.

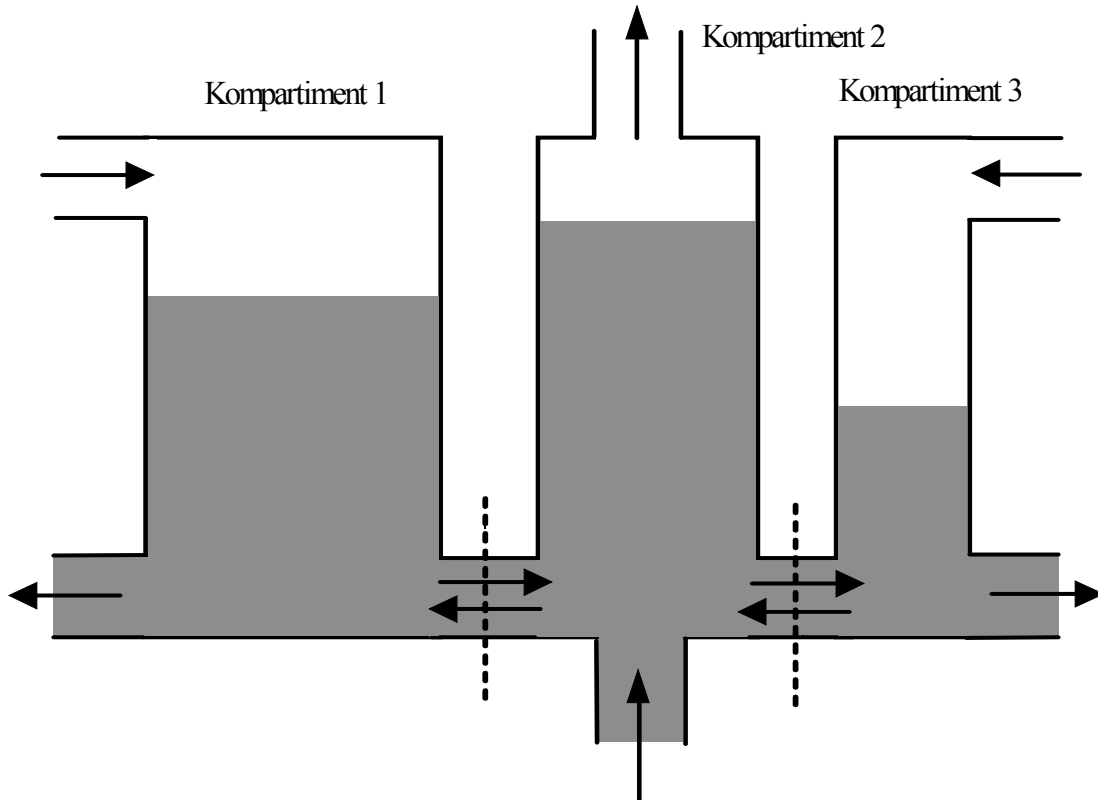


Abb.3: Transferraten zwischen den Kompartimenten (gestrichelte Linien) verhindern die Einstellung eines Verteilungsgleichgewichtes in Level III. Das Fließgleichgewicht bleibt bestehen.

Die unterschiedliche Füllhöhe der Röhren in Abb.3 sind das Resultat der durch gepunktete Linien angedeuteten Transferwiderstände zwischen den Kompartimenten. Die Transferwiderstände für einen Übergang der Chemikalie aus z.B. Kompartiment 1 in Kompartiment 2 und vice versa sind i.a. nicht gleich groß, da nichtdiffusive Austauschprozesse zu berücksichtigen sind, die an der Phasengrenze nur in einer Richtung erfolgen. Bei zeitlich konstanten Ein- und Austrägen ergibt sich ein stationärer Zustand.

Level III ist die erste Stufe bei Multimedia-Kompartimentmodellen, in der alle wesentlichen Transport- und Austauschprozesse, wenn auch stark vereinfacht, berücksichtigt sind:

- Verteilung (ab Level I)
- Abbau/Transformation (ab Level II)
- Phasenübergänge/Transferprozesse (ab Level III).

REMODE ist in dieser Klassifikation ein Level III Modell.

## 2.2 Das Fugazitätskonzept

Im Rahmen der Multimedien-Modellierung entwickelte Mackay das *Fugazitätskonzept*. Das Wort *Fugazität* (lat. fuga: die Flucht; fugere: fliehen) wurde von Paterson und Mackay, 1985 als

*„Escaping tendency of a substance from a phase“*

definiert. Treten in realen Gasen Abweichungen vom idealen Verhalten auf, wird anstatt des Druckes bzw. Partialdruckes in den entsprechenden Formeln in der Physikalischen Chemie die Fugazität eingesetzt, ähnlich der Aktivität für die Konzentration in nicht-idealen Lösungen. Liegt ein Verteilungsgleichgewicht zwischen sich berührenden Phasen vor, sind die Fugazitäten einer Chemikalie als Ergebnis der Gleichheit des chemischen Potentials in diesen Phasen gleich.

Die Fugazität hat für Massenströme dieselbe Bedeutung wie die Temperatur für Wärmeströme: so wie Wärme von der höheren zur niedrigeren Temperatur fließt, so fließt die Masse von der Phase mit der höheren Fugazität zur Phase mit der niedrigeren.

Zur Umrechnung der Konzentration [mol/m<sup>3</sup>] in Fugazität [Pa] dient ein Faktor Z, der *Fugazitätskapazität* genannt wird. Man postuliert

$$C = Z(x,y,...) f \quad , \quad 2.1$$

wobei  $Z$  nicht notwendigerweise konstant sein muss, sondern von der Natur der Chemikalie, des Kompartimentes und der Temperatur abhängen kann. Im Bild der kommunizierenden Röhren kann man die Fugazität der Substanz als die Höhe der Röhre, die Fugazitätskapazität des Kompartiments als deren Breite und die Konzentration als deren Fläche ansehen.

Liegt eine Gleichgewichtsverteilung einer Chemikalie in zwei sich berührenden Phasen 1 und 2 vor, so gilt für den Verteilungskoeffizienten  $K_{12}$

$$\begin{aligned} K_{12} &= C_{\text{Phase 1}} / C_{\text{Phase 2}} = fZ_{\text{Phase 1}} / fZ_{\text{Phase 2}} = \\ &= Z_{\text{Phase 1}} / Z_{\text{Phase 2}} \quad , \end{aligned} \quad 2.2$$

Die für eine Level I Modellierung notwendigen Fugazitätskapazitäten werden so definiert, dass die Quotienten aus zwei Konzentrationen in unterschiedlichen Kompartimenten im Verteilungsgleichgewicht als dimensionslose Verteilungskoeffizienten  $K_{ij}$  erscheinen. Eine detailliertere Erklärung zur Berechnung der Fugazitätskapazitäten für Umweltkompartimente ist Mackay, 1991 zu entnehmen. Hier seien nur die Grundprinzipien erläutert:

Für eine Chemikalie im Gaszustand unter Umweltbedingungen setzt Mackay näherungsweise an:

$$C = (1 / R T) f \quad , \quad 2.3$$

mit der Gaskonstante  $R = 8,314 \text{ Pa m}^3 / \text{mol K}$ . Aus dem Vergleich mit Gl. 2.1 ergibt sich somit  $Z_{\text{Luft}}$  nach

$$Z_{\text{Luft}} = 1 / R T. \quad 2.4$$

$Z_{\text{Wasser}}$  berechnet sich aus dem Kehrwert der Henrykonstante. Dieser ergibt sich aus dem Quotienten von Dampfdruck und Wasserlöslichkeit der Chemikalie für denselben Aggregatzustand.

Die  $Z$ -Werte der restlichen im Modell berücksichtigten Kompartimente, lassen sich aus  $Z_{\text{Luft}}$ ,  $Z_{\text{Wasser}}$  und weiteren Verteilungskoeffizienten nach z.B.:

$$\begin{aligned} Z_{\text{Boden}} &= K_P \rho_{\text{Boden}} / H \\ Z_{\text{Biota}} &= K_B \rho_{\text{Biota}} / H = \text{BCF} / H \end{aligned} \quad 2.5$$

mit:  $K_i$  = Verteilungskoeffizient,  $\rho_i$  = Dichte,  $H$  = Henrykonstante bzw.  $Z_{\text{Wasser}}^{-1}$ ,  $\text{BCF}$  = Biokonzentrationsfaktor bestimmen.

Für Modellierungen ab Level II und höher sind neben der Verteilung noch diffusive und nicht-diffusive Transportprozesse zu unterscheiden und zu erfassen. Alle diese Transportprozesse werden im Fugazitätskonzept als Produkte aus Fugazität und

Transferraten (sog. *D-values*) ausgedrückt. Danach lässt sich der diffusive Fluss  $N$  (mol/h) zwischen den Kompartimenten 1 und 2 schreiben als:

$$N_{\text{Diffusion}} = D_{12} (f_1 - f_2) \quad 2.6$$

Nicht-diffusive Transportprozesse wie u.a. Advektion (Massenfluss in Luft bzw. Wasser), nasse und trockene Partikel-Deposition mit ihren Flussraten  $G$  (m<sup>3</sup>/h) werden über

$$N_{\text{nicht-diff}} = G C = G Z f = D f \quad 2.7$$

angesetzt. Analog werden Abbauprozesse 1ter Ordnung mit ihren charakteristischen Geschwindigkeitskonstanten  $k_R$ , nach

$$N_{\text{abbau}} = k_R V C = k_R V Z f = D_R f \quad 2.8$$

berechnet. Für eine Expositionsabschätzung nach dem Fugazitätskonzept ist es somit notwendig, die Fugazitätskapazitäten  $Z$  und die Transferraten  $D$  zu berechnen oder zu kennen. Mittels diesen können anschließend die Fugazitäten und damit letztlich die Konzentrationen in den Umweltkompartimenten bestimmt werden. Im Ergebnis gibt es keinen Unterschied zwischen einer Kalkulation über Fugazitäten oder über Konzentrationen. Mackay hält den Weg über Fugazitäten aber für anschaulicher.

Mit zunehmendem Modell-Level erhöht Mackay auch die Anzahl der Kompartimente. In den Levels I und II werden  $\geq 6$  Kompartimente (Luft, Wasser, Boden, u.a.) berücksichtigt. Ab Level III wird zwischen vier Hauptkompartimenten (sog. Bulk Compartments) - Luft, Wasser, Boden, Sediment - und div. Subkompartimenten unterschieden. Die Hauptkompartimente bestehen dabei aus einer Kombination von Subkompartimenten, die als reine Phasen zu einem definierten Volumenanteil  $\phi_{ij}$  im Hauptkompartiment vorhanden sind. Beispielsweise besteht das Hauptkompartiment Wasser aus den drei Subkompartimenten Wasser, suspendiertes Sediment und Fisch/Biota.

Innerhalb eines jeden Hauptkompartimentes wird bzgl. der Chemikalie von einem Zustand der Gleichverteilung ausgegangen, d.h. **die Fugazität der Chemikalie ist in allen Subkompartimenten eines Hauptkompartimentes gleich groß**. Dies folgt der Vorstellung, dass die Zeit zum Erreichen des Gleichgewichtszustandes *innerhalb* eines Hauptkompartimentes, wesentlich kürzer ist als im Fall des Gleichgewichts *zwischen* unterschiedlichen Hauptkompartimenten. Welche Konsequenzen dies für die Berechnung der Fugazitätskapazitäten hat, sei im Folgenden am Beispiel des  $Z$ -Wertes für das Hauptkompartiment Luft erläutert.



Das Hauptkompartiment Luft (Index 1) wird im Allgemeinen als Summe aus zwei Subkompartimenten angesetzt: „reiner“ Luft und Aerosolpartikeln. Es gilt:

$$Z_1 = Z_{\text{Luft}} + \phi_{1\text{-Aerosol}} Z_{\text{Aerosol}} \quad . \quad 2.9$$

Die Berechnung von  $Z_{\text{Aerosol}}$  erfordert Näherungen für Adsorptions- und Desorptionsprozesse. Nach Mackay et al., 1986 gilt für den dimensionslosen Partikel-Luft-Verteilungskoeffizient  $K_{\text{Luft-Aersole}}$ :

$$K_{\text{Luft-Aersole}} = Z_{\text{Aerosol}} / Z_{\text{Luft}} = 6 \cdot 10^6 / P_L^S, \quad 2.10$$

wobei  $P_L^S$  der Dampfdruck (Pa) der unterkühlten Schmelze der reinen Chemikalie ist. Mit Gl. 2.4 ergibt sich somit für  $Z_{\text{Aerosol}}$ :

$$Z_{\text{Aerosol}} = 6 \cdot 10^6 / (P_L^S RT). \quad 2.11$$

Ist von der Chemikalie nur der Dampfdruck der reinen Festsubstanz  $P_S^S$  bekannt, ist eine Berechnung von  $P_L^S$  nach Mackay et al., 1992a möglich. Man erhält:

$$P_L^S = P_S^S / [\exp \{6,79 \cdot (1 - T_{\text{Schmelz}} / T_{\text{Umgebung}})\}] \quad 2.12$$

Das Beispiel der Berechnung der Fugazitätskapazität des Hauptkompartimentes Luft macht deutlich, wie eine größere Anpassung des Umweltmodells nur auf Kosten zusätzlicher Daten zu erbringen ist. Die *realistischere* Beschreibung der Luft als „reine Luft & Aerosolpartikel“ erfordert die Kenntnis sowohl des Volumenanteils  $\phi_{1\text{-Aerosol}}$  als auch des Dampfdrucks der unterkühlten Schmelze der Chemikalie. Letzterer ist eine physikalisch-chemische Eigenschaft, die einerseits nur in begrenztem Umfang als validierter Wert für alte Stoffe vorhanden ist, andererseits in keinem Zulassungsverfahren neuer Stoffe auf nationaler Ebene prinzipiell vorgelegt werden muss. Aus diesem Grund wird bei einer Modellierung ab Level III meistens Gl. 2.12 zur Anwendung kommen. Diese Gleichung ist aber als Näherung/Abschätzung des *wahren* Wertes anzusehen und bedeutet daher per definitionem eine in Kauf genommene Unsicherheit im Modellergebnis. Diese Problematik ist auf die Ermittlung der Transferraten  $D$  übertragbar, da diese ihrerseits über Abschätzfunktionen berechnet werden müssen, bzw. die Bestimmung von Faktoren wie u.a. Regenrate und Aerosoldeposition erfordern. In der Modellergebnisinterpretation gilt es, dies zu berücksichtigen.

## 3 Die Basisgleichungen in REMODE

### 3.1 Kompartimente und Fugazitätskapazitäten

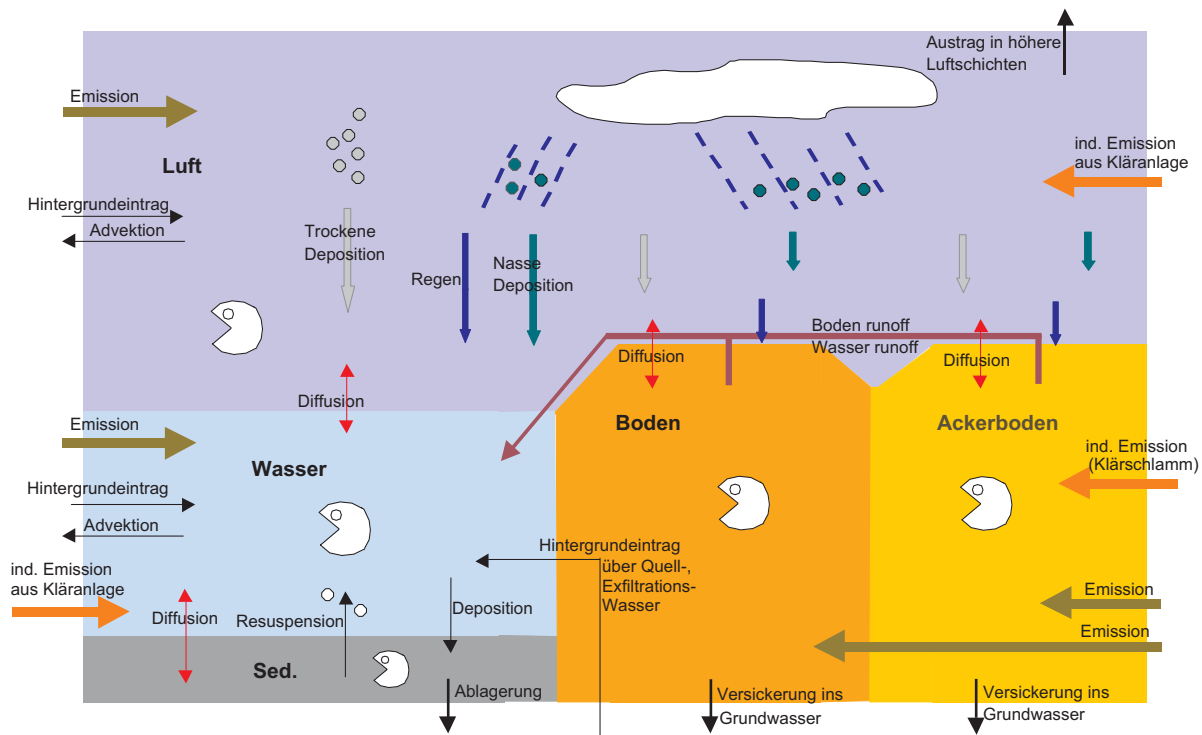


Abb. 4: Hauptkompartimente und berücksichtigte Prozesse in REMODE

REMODE besteht aus fünf Haupt- oder Bulk-Kompartimenten: Luft ( $i=1$ ), Wasser ( $i=2$ ), Boden ( $i=3$ ), Ackerboden ( $i=4$ ) und Sediment ( $i=5$ ). Jedes dieser Hauptkompartimente mit seinem definierten Volumen  $V_i$  [ $m^3$ ] besteht aus einer Kombination von sog. Subkompartimenten  $n$  mit den Volumina  $V_{in}$ . Die Subkompartimente  $n$  definieren sich über den Volumenanteil  $\phi_{in}$  am jeweiligen Hauptkompartiment  $i$  nach:

$$\phi_{in} = \frac{V_{in}}{V_i} \quad 3.1$$

Analog Mackay und Paterson, 1991 werden für die Hauptkompartimente  $i$  eigene Fugazitätskapazitäten  $Z_{bi}$  berechnet über

$$Z_{bi} = \sum_n \phi_{in} Z_{in} \quad 3.2$$

wobei  $Z_{in}$  der Fugazitätskapazität des Subkompartimentes  $n$  im Hauptkompartiment  $i$  entspricht. Alle Fugazitätskapazitäten haben die Einheit  $\text{mol}/(\text{Pa} \times \text{m}^3)$ . Wie in REMODE die einzelnen Fugazitätskapazitäten der Haupt- und Subkompartimente ( $Z_{bi}$  bzw.  $Z_{in}$ ) im Einzelnen berechnet werden, zeigen die folgenden Kapitel.

### 3.1.1 Hauptkompartiment Luft $Z_{b1}$

Für das Hauptkompartiment Luft wird angenommen, dass es aus den Subkompartimenten *reine* Luft und Aerosole besteht. Somit erhält man  $Z_{b1}$  nach

$$Z_{b1} = Z_{11} + \underbrace{\phi_{13} \times Z_{13}}_{\text{Aerosole}} \quad 3.3$$

wobei  $Z_{11}$  der Fugazitätskapazität für reine Luft und  $Z_{13}$  der Fugazitätskapazität für Aerosole entspricht, die folgendermaßen berechnet werden

$$Z_{11} = \frac{1}{R \times T} \quad \text{und} \quad Z_{13} = Z_{11} \times \frac{6 \cdot 10^6}{P_{sl}} \quad 3.4 \text{ u. } 3.5$$

mit  $R$  als der Gaskonstanten ( $8,314 \text{ Pa m}^3/\text{mol} \times \text{K}$ ),  $T$  als der mittleren Umgebungstemperatur von Baden-Württemberg in [K] und  $P_{sl}$  als dem Dampfdruck der Umweltchemikalie (im folgenden immer abgekürzt als UC) als unterkühlte Schmelze in [Pa]. Die Berechnung von  $P_{sl}$  ist notwendig bei Substanzen deren Schmelzpunkt  $T_m > T$  ist. Andernfalls ist für die Berechnung von  $Z_{13}$  der Dampfdruck der UC bei der Temperatur  $T$ ,  $P(T)$  zu verwenden.  $P_{sl}$  erhält man über

$$P_{sl} = \frac{P(T)}{e^{6,79 \times (1 - \frac{T_m}{T})}} \quad 3.6$$

mit  $T_m$  als dem Schmelzpunkt der UC in [K] und  $P(T)$  als dem Dampfdruck der UC bei  $T$  in [Pa] [Mackay et al., 1986].

$P(T)$  wird über die Clausius-Clapeyron-Gleichung

$$P(T) = P(25) \times e^{\left[ \frac{H_v}{R} \times \left( \frac{1}{298} - \frac{1}{T} \right) \right]} \quad 3.7$$

berechnet mit  $P(25)$  als dem Dampfdruck der UC bei 25°C in [Pa] und  $H_v$  als der Verdampfungsenthalpie in [J/mol] [Shiu und Mackay, 1986]. Liegt kein Messwert für  $H_v$  vor wird dieser über die Troutonsche Regel errechnet [Atkins, 1988].

### 3.1.2 Hauptkompartiment Wasser $Z_{b2}$

Für das Hauptkompartiment Wasser wird angenommen, dass es aus den Subkompartimenten *reines* Wasser, Feststoffe im Wasser und Biota im Wasser zusammengesetzt ist. Man erhält  $Z_{b2}$  somit nach

$$Z_{b2} = Z_{22} + \underbrace{\phi_{23} \times Z_{23}}_{\substack{\text{Feststoffe} \\ \text{im Wasser}}} + \underbrace{\phi_{24} \times Z_{24}}_{\text{Biota im Wasser}} \quad 3.8$$

wobei  $Z_{22}$  der Fugazitätskapazität für reines Wasser,  $Z_{23}$  der Fugazitätskapazität für Feststoffe in Wasser und  $Z_{24}$  derer für Biota im Wasser entspricht. Diese werden berechnet über

$$Z_{22} = \frac{1}{H(T)}; \quad Z_{23} = \frac{\rho_{23} \times x_{23} \times K_{oc}}{H(T) \times 1000} \quad \text{und} \quad Z_{24} = \frac{\rho_{24} \times x_{xl} \times K_{ow}}{H(T) \times 1000} \quad 3.9 - 3.11$$

mit  $H(T)$  als der Henrykonstanten bei  $T$  in [(Pa×m<sup>3</sup>)/mol],  $\rho_{23}$  als der Dichte der *reinen* Feststoffe im Wasser in [kg/m<sup>3</sup>],  $x_{23}$  als dem Anteil organischen Kohlenstoffs an den Feststoffen im Wasser [dim.los],  $K_{oc}$  als dem Verteilungskoeffizient für organischen Kohlenstoff [dim.los],  $\rho_{24}$  als der Dichte von Biota im Wasser in [kg/m<sup>3</sup>],  $x_{xl}$  als dem Gehalt der Lipide in Fisch [dim.los] und  $K_{ow}$  als dem Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizienten [dim.los]. Die Henrykonstante  $H(T)$  ist der Quotient

$$H(T) = \frac{P(T)}{S(T)} \quad 3.12$$

aus dem Dampfdruck  $P(T)$  und der Wasserlöslichkeit  $S(T)$  der UC bei der Temperatur  $T$ .

Die Temperaturkorrektur der Wasserlöslichkeit erfolgt in Anlehnung an jene für den Dampfdruck (s.o.) nach einer Exponentialfunktion über

$$S(T) = S(25) \times e^{\left[ \frac{H_s}{R} \times \left( \frac{1}{298K} - \frac{1}{T} \right) \right]} \quad 3.13$$

mit  $S(25)$  als der Wasserlöslichkeit der UC bei 25°C in [mol/m<sup>3</sup>] und  $H_s$  als der Lösungsenthalpie in [J/mol] [Brandes et al., 1996]. Der  $K_{oc}$  wird, wo nicht als Messwert vorliegend, über den  $K_{ow}$  nach

$$K_{oc} = 0,41 \times K_{ow} \quad 3.14$$

abgeschätzt.

### 3.1.3 Hauptkompartimente Boden $Z_{b3}$ und Ackerboden $Z_{b4}$

Für die Hauptkompartimente Boden und Ackerboden wird angenommen, dass sie aus den Subkompartimenten Porenluft, Porenwasser und *reinem* Boden bestehen.  $Z_{b3}$  und  $Z_{b4}$  ergeben sich somit nach

$$Z_{b3} = \phi_{31} \times Z_{31} + \phi_{32} \times Z_{32} + \phi_{33} \times Z_{33} \quad 3.15$$

$$Z_{b4} = \phi_{41} \times Z_{31} + \phi_{42} \times Z_{32} + \phi_{43} \times Z_{44} \quad 3.16$$

Porenluft im Boden/ Ackerboden	Porenwasser im Boden/ Ackerboden	Reine Boden/ Ackerboden- festsubstanz
--------------------------------------	--	---

wobei  $Z_{31}$  der Fugazitätskapazität für Porenluft im Boden/Ackerboden,  $Z_{32}$  der Fugazitätskapazität für Porenwasser im Boden/Ackerboden,  $Z_{33}$  der Fugazitätskapazität für *reine* Bodenfestsubstanz und  $Z_{44}$  derer für *reine* Ackerbodenfestsubstanz entspricht. Da  $Z_{31}$  und  $Z_{32}$  somit als reine Phasen zu betrachten sind berechnen sich die Fugazitätskapazitäten entsprechend nach

$$Z_{31} = Z_{11} \text{ und } Z_{32} = Z_{22}.$$

$Z_{33}$  und  $Z_{44}$  werden berechnet über

$$Z_{33} = \frac{\rho_{33} \times x_{33} \times K_{oc}}{H(T) \times 1000} \text{ und } Z_{44} = \frac{\rho_{44} \times x_{44} \times K_{oc}}{H(T) \times 1000} \quad 3.17 \text{ u. } 3.18$$

mit  $\rho_{33}$  als der Dichte der reinen Bodenfestsubstanz in [kg/m<sup>3</sup>],  $x_{33}$  als dem Anteil organischen Kohlenstoffs an der reinen Bodenfestsubstanz [dim.los],  $\rho_{44}$  als der

Dichte der reinen Ackerbodenfestsubstanz in  $[\text{kg}/\text{m}^3]$  und  $x_{44}$  als dem Anteil organischen Kohlenstoffs an der reinen Ackerbodenfestsubstanz  $[\text{dim.los}]$ . Da auch  $Z_{33}$  und  $Z_{44}$  als reine Phasen betrachtet werden gilt für ihre Dichten

$$\rho_{44} = \rho_{33} = \rho_{23}.$$

Die Anteile organischen Kohlenstoffs in den beiden Böden wurde in REMODE als gleich groß angesetzt ( $x_{44}=x_{33}$ ).

### 3.1.4 Hauptkompartiment Sediment $Z_{b5}$

Für das Hauptkompartiment Sediment wird angenommen, dass es aus den Subkompartimenten Porenwasser und fester Sedimentsubstanz besteht. Man erhält  $Z_{b5}$  somit nach

$$Z_{b5} = \underbrace{\phi_{52} \times Z_{52}}_{\substack{\text{Porenwasser} \\ \text{im Sediment}}} + \underbrace{\phi_{53} \times Z_{53}}_{\substack{\text{Feste Sediment-} \\ \text{substanz}}} \quad 3.19$$

wobei  $Z_{52}$  der Fugazitätskapazität für Porenwasser im Sediment und  $Z_{53}$  der Fugazitätskapazität für feste Sedimentsubstanz entspricht. Das Porenwasser wird als reine Wasserphase angesehen, so dass sich die Fugazitätskapazität ergibt über

$$Z_{52} = Z_{22}.$$

$Z_{53}$  wird berechnet nach

$$Z_{53} = \frac{\rho_{53} \times x_{53} \times K_{oc}}{H(T) \times 1000} \quad 3.20$$

mit  $\rho_{53}$  als der Dichte der festen Sedimentsubstanz in  $[\text{kg}/\text{m}^3]$  und  $x_{53}$  als dem Anteil organischen Kohlenstoffs in fester Sedimentsubstanz  $[\text{dim.los}]$ . Da auch  $Z_{53}$  als reine Phase betrachtet wird gilt wie bei der Festsubstanz des Bodens bzw. Ackerbodens für ihre Dichte

$$\rho_{53} = \rho_{23}.$$

## 3.2 Transferraten

Zur Berechnung der diffusiven und nicht-diffusiven Transportprozesse zwischen Hauptkompartimenten müssen deren individuelle Transferraten berechnet werden. Die Berechnung der Transferraten folgt dabei im Wesentlichen derer nach Mackay, 1991. *Gewinne* für das Hauptkompartiment  $i$  ergeben sich durch Chemikalien-Transfer aus den Hauptkompartimenten  $j$  in  $i$  hinein nach

$$\sum_{j=1}^5 [D_{j \rightarrow i} f_j]. \quad 3.21$$

Der Index  $j \rightarrow i$  symbolisiert hierbei die Richtung des Transportprozesses. Ein einzelnes  $D_{j \rightarrow i}$  setzt sich dabei häufig aus mehreren individuellen Transferraten zusammen (s.w.u.).

Entsprechend errechnen sich *Verluste* für das Hauptkompartiment  $i$  durch Chemikalien-Transfer aus dem Hauptkompartiment  $i$  heraus in die angrenzenden Hauptkompartimente  $j$  nach

$$\sum_{j=1}^5 [D_{i \rightarrow j} f_i]. \quad 3.22$$

In den folgenden Kapiteln wird gezeigt, wie die Transferraten in REMODE berechnet werden.

### 3.2.1 Luft $\leftrightarrow$ Wasser ( $D_{1 \rightarrow 2}$ und $D_{2 \rightarrow 1}$ )

Folgende Transportprozesse zwischen den Hauptkompartimenten Luft und Wasser werden berücksichtigt: Diffusion  $D_{v21}$ , Regen  $D_{qw}$ , nasse Deposition  $D_{dw}$  und trockene Deposition  $D_{pw}$ . Für die Summe aller Transferprozesse aus der Luft in Richtung Wasser  $D_{1 \rightarrow 2}$  bzw. aus dem Wasser in Richtung Luft  $D_{2 \rightarrow 1}$  ergibt sich

$$D_{1 \rightarrow 2} = D_{v21} + D_{qw} + D_{dw} + D_{pw} \quad 3.23$$

$$D_{2 \rightarrow 1} = D_{v21} \quad 3.24$$

Der diffusive Austausch zwischen Luft und Wasser wird nach

$$D_{v21} = \frac{1}{\frac{1}{K_{va} \times A_2 \times Z_{11}} + \frac{1}{K_{vw} \times A_2 \times Z_{22}}} \quad 3.25$$

mit  $K_{va}$  als dem Massentransferkoeffizienten (= MTC) der Luftseite in [m/h],  $A_2$  als der Fläche des Wasserkompartmentes in [m<sup>2</sup>] und  $K_{vw}$  als dem MTC der Wasserseite in [m/h] bestimmt.  $K_{va}$  und  $K_{vw}$  wiederum werden berechnet über

$$K_{va} = 0,01 \times (0,3 + 0,2 \times v10) \times \left( \frac{18 \text{ g/mol}}{M} \right)^{0,4355} \times 3600 \text{ s/h} \quad 3.26$$

und

$$K_{vw} = 0,01 \times (0,0004 + 0,00004 \times v10) \times \left( \frac{32 \text{ g/mol}}{M} \right)^{0,4047} \times 3600 \text{ s/h} \quad 3.27$$

wobei  $v10$  der jahresdurchschnittlichen Windgeschwindigkeit 10 m über Grund in [m/s] und  $M$  der Molmasse der UC in [g/mol] entspricht [Brandes et al., 1996].

Regen wird nach

$$D_{qw} = A_2 \times U_q \times Z_{22} \quad 3.28$$

berechnet, mit  $U_q$  als der Regenrate in [m/h]. Die Berechnung der nassen Deposition erfolgt über

$$D_{dw} = A_2 \times U_q \times Q \times \phi_{13} \times Z_{13} \quad 3.29$$

mit  $Q$  als dem Verhältnis von Luftsäule zum Regentropfenvolumen [dim.los]. Die trockene Deposition folgt aus

$$D_{pw} = A_2 \times U_p \times \phi_{13} \times Z_{13} \quad 3.30$$

mit  $U_p$  als der Absinkgeschwindigkeit der Aerosolpartikel in [m/h].



### 3.2.2 Luft ↔ Boden bzw. Luft ↔ Ackerboden

Zwischen den Hauptkompartimenten Luft und Boden bzw. Luft und Ackerboden finden grundsätzlich dieselben Transportprozesse statt wie zwischen Luft und Wasser: Diffusion  $D_{s31}$  bzw.  $D_{s41}$ , Regen  $D_{qs}$  bzw.  $D_{qsL}$ , nasse Deposition  $D_{ds}$  bzw.  $D_{dsL}$  und trockene Deposition  $D_{ps}$  bzw.  $D_{psL}$ . Für die Summe aller Transferprozesse aus der Luft in Richtung Boden  $D_{1 \rightarrow 3}$  bzw. Ackerboden  $D_{1 \rightarrow 4}$  und aus dem Boden bzw. Ackerboden in Richtung Luft  $D_{3 \rightarrow 1}$  bzw.  $D_{4 \rightarrow 1}$  ergibt sich

$$D_{1 \rightarrow 3} = D_{s31} + D_{qs} + D_{ds} + D_{ps} \quad 3.31$$

$$D_{3 \rightarrow 1} = D_{s31} \quad 3.32$$

$$D_{1 \rightarrow 4} = D_{s41} + D_{qsL} + D_{dsL} + D_{psL} \quad 3.33$$

$$D_{4 \rightarrow 1} = D_{s41} \quad 3.34$$

Der diffusive Austausch zwischen Luft und Boden  $D_{s31}$  wird nach

$$D_{s31} = \frac{1}{\frac{1}{K_{sa} \times A_3 \times Z_{11}} + \frac{Y_3}{A_3 \times (B_{13} \times Z_{11} + B_{23} \times Z_{22})}} \quad 3.35$$

berechnet, wobei sich  $D_{s41}$  analog mit den Werten  $Y_4$  für  $Y_3$ ,  $A_4$  für  $A_3$ ,  $B_{14}$  für  $B_{13}$  und  $B_{24}$  für  $B_{23}$  ergibt. Dabei sind  $Y_3$  bzw.  $Y_4$  die Diffusionstiefen in Boden(3) bzw. Ackerboden(4) in [m],  $A_3$  bzw.  $A_4$  sind die Flächen des Boden(3)- bzw. Ackerbodenkompartimentes(4) in [m<sup>2</sup>],  $K_{sa}$  ist der MTC der Luftseite in [m/h],  $B_{13}$  bzw.  $B_{14}$  sind die effektiven Diffusionskoeffizienten der UC in der Porenluft des Bodens bzw. Ackerbodens in [m<sup>2</sup>/h] und  $B_{23}$  bzw.  $B_{24}$  sind die effektiven Diffusionskoeffizienten der UC im Porenwasser des Bodens bzw. Ackerbodens in [m<sup>2</sup>/h]. Nach Mackay et al., 1992 und Brandes et al., 1996 ist  $K_{sa} = K_{va}$ .  $B_{13}$  wird berechnet über die Millington-Quirk-Gleichung

$$B_{13} = \frac{\left( B_{ma} \times \phi_{31} \left( \frac{10}{3} \right) \right)}{(\phi_{31} + \phi_{32})^2} \quad 3.36$$

mit  $B_{ma}$  als dem molekularen Diffusionskoeffizienten der UC in Luft in [m<sup>2</sup>/h]. In REMODE unterscheiden sich der Boden und Ackerboden bzgl. dieses Parameters nicht und es wurde  $B_{14} = B_{13}$  gesetzt.

$B_{23}$  und  $B_{24}$  wurden ebenfalls über eine Millington-Quirk-Gleichung

$$B_{24} = \frac{\left( B_{mw} \times \phi_{42}^{\left(\frac{10}{3}\right)} \right)}{\left( \phi_{41} + \phi_{42} \right)^2} \quad 3.37$$

mit  $B_{mw}$  als dem molekularen Diffusionskoeffizienten der UC in Wasser in [m<sup>2</sup>/h] berechnet. Auch bzgl. dieses Parameters wurde in REMODE keine Unterscheidung zwischen Boden und Ackerboden vorgenommen und  $B_{24} = B_{23}$  gesetzt. Die Gleichungen zur Berechnung der molekularen Diffusionskoeffizienten der UC in Luft  $B_{ma}$  bzw. Wasser  $B_{mw}$

$$B_{ma} = 8,6 \times 0,001 \times T^{1,75} \times \frac{\left( \frac{29 + M}{29 \times M} \right)^{0,5}}{\left( 2,7 + V_m \frac{1}{3} \right)^2} \times \frac{1}{24} \quad 3.38$$

und

$$B_{mw} = \frac{0,00000065 \times (2,6 \times 18)^{0,5} \times T}{1,4 \times V_m^{0,6} \times 24} \quad 3.39$$

mit  $V_m$  als dem Molvolumen der UC in [cm<sup>3</sup>/mol] wurden dem *Final Draft Report Benzene* der EPA [Chiao et al., 1994]<sup>4</sup> entnommen.

Regen wird analog zu  $D_{qw}$  (s.o.) nach

$$D_{qs} = A_3 \times U_q \times Z_{22} \quad 3.40$$

berechnet.  $D_{qSL}$  errechnet sich entsprechend mit dem Wert  $A_4$  für  $A_3$ . Die nasse Deposition  $D_{ds}$  bzw.  $D_{dsL}$  als auch die trockene Deposition  $D_{ps}$  bzw.  $D_{psL}$  erfolgt ebenfalls wie bei  $D_{dw}$  bzw.  $D_{pw}$  (s.o.) mit der jeweils anderen Fläche.

---

<sup>4</sup> Dem Faktor 1,4 für die Viskosität des Wassers bei T im Nenner von  $B_{mw}$  liegt eine Schätzung der Autoren aus Literaturwerten zugrunde [Kuchling, 1989].

### 3.2.3 Wasser ↔ Sediment

Zwischen den Hauptkompartimenten Wasser und Sediment werden folgende Transportprozesse modelliert: Diffusion  $D_y$ , Deposition (Sedimentation)  $D_{dx}$  und Resuspension  $D_{rx}$ . Für die Summe aller Transferprozesse aus dem Wasser in Sediment  $D_{2 \rightarrow 5}$  bzw. aus dem Sediment in Richtung Wasser  $D_{5 \rightarrow 2}$  ergibt sich

$$D_{2 \rightarrow 5} = D_y + D_{dx} \quad 3.41$$

$$D_{5 \rightarrow 2} = D_y + D_{rx} \quad 3.42$$

Der diffusive Austausch zwischen Wasser und Sediment  $D_y$  wird nach

$$D_y = \frac{I}{\frac{I}{K_{yw} \times A_5 \times Z_{22}} + \frac{Y_5}{B_{25} \times A_5 \times Z_{22}}} \quad 3.43$$

berechnet, mit  $Y_5$  als der Diffusionstiefe im Sediment(5) in [m],  $K_{yw}$  als dem MTC der Wasserseite in  $[\text{m}/\text{h}]^5$ ,  $A_5$  als der Fläche des Sedimentkompartimentes in  $[\text{m}^2]$  und  $B_{25}$  als der effektive Diffusionskoeffizient der UC im Sedimentwasser in  $[\text{m}^2/\text{h}]$ .  $B_{25}$  wird berechnet über die Millington-Quirk-Gleichung

$$B_{25} = \frac{\left( B_{mw} \times \phi_{52} \left( \frac{10}{3} \right) \right)}{\phi_{52}^2} \quad 3.44$$

mit  $B_{mw}$  als dem molekularen Diffusionskoeffizienten der UC in Wasser in  $[\text{m}^2/\text{h}]$  (s.o.).

Die Deposition wird nach

$$D_{dx} = G_{dx} \times Z_{23} \quad 3.45$$

berechnet, mit  $G_{dx}$  als der Sedimentdeposition in  $[\text{m}^3/\text{h}]$ , die wiederum als das Produkt aus Sedimentdepositionsrate  $U_{dx}$  und der Sedimentfläche  $A_5$  angesetzt wird.

---

<sup>5</sup>  $K_{yw}$  wird in REMODE auf 0,01 m/h gesetzt [Brandes et al., 1996]

Die Resuspension wird analog über

$$D_{rx} = G_{rx} \times Z_{53} \quad 3.46$$

berechnet, mit  $G_{rx}$  als der Sedimentresuspension in  $[m^3/h]$ , die entsprechend dem Produkt aus Sedimentresuspensionsrate  $U_{rx}$  und der Sedimentfläche  $A_5$  entspricht.

### 3.2.4 Boden ↔ Wasser bzw. Ackerboden ↔ Wasser

Zwischen den Hauptkompartimenten Boden und Wasser bzw. Ackerboden und Wasser finden *jeweils nur in Richtung Wasser* zwei Transportprozesse statt: *Boden Runoff* und *Wasser Runoff*. In Richtung Boden bzw. Ackerboden erfolgt kein Transport. Für die Summe aus beiden Prozessen in Richtung Wasser für Boden  $D_{32}$  bzw. Ackerboden  $D_{132}$  ergibt sich somit

$$D_{32} = (A_3 \times U_{sw} \times Z_{33}) + (A_3 \times U_{ww} \times Z_{22}) \quad 3.47$$

$$D_{132} = (A_4 \times U_{sw} \times Z_{44}) + (A_4 \times U_{ww} \times Z_{22}) \quad 3.48$$

mit  $U_{sw}$  als der Verlustrate durch Bodenerosion in  $[m/h]$  und  $U_{ww}$  als der Regenwasserabflussrate in  $[m/h]$ , wobei  $U_{ww}$  als 35% der Regenrate  $U_q$  angesetzt wird [LfU, 1979].

## 3.3 Gewinne und Verluste

Neben den Transferprozessen zwischen den Hauptkompartimenten wird die Konzentration der Chemikalie in den Hauptkompartimenten selbst durch direkte und indirekte Emission sowie durch Hintergrundeinträge erhöht (Gewinne), als auch durch advective und pseudoadvective Austräge, sowie Abbauprozesse erniedrigt (Verluste). Mit Ausnahme des Chemikalienabbaus innerhalb der Kompartimente, finden diese Prozesse im Austausch mit der die Zielregion umgebenden Umwelt statt.

### 3.3.1 Emissionen und Hintergrundeinträge

Für die fünf Hauptkompartimente in REMODE können unterschiedlichste Emissionsszenarien entworfen werden. Die gesamte Emission in ein

Hauptkompartiment  $N_i$  in [mol/h] setzt sich dabei z.T. aus einer direkten Emission  $E_i$  und einer indirekten Emission  $E_{ki}$  zusammen nach

$$N_1 = E_1 + E_{k1} \quad 3.49$$

$$N_2 = E_2 + E_{k2} \quad 3.50$$

$$N_3 = E_3 \quad 3.51$$

$$N_4 = E_4 + E_{k4} \quad 3.52$$

$$N_5 = E_5 \quad 3.53$$

wobei die indirekten Emissionen Beiträge der biologischen Kläranlage darstellen:  $E_{k1}$  ist die indirekte Emission über die Kläranlage in Luft in [mol/h],  $E_{k2}$  ist die indirekte Emission ins Wasser durch behandeltes Abwasser in [mol/h] und  $E_{k4}$  ist die indirekte Emission über Klärschlamm in den Ackerboden in [mol/h] (bzgl. der Berechnung der einzelnen Kläranlagenbeiträge s. Kap. 4.4).

Neben der Emission können Substanzen auch über die sehr beweglichen Medien Luft und Wasser aus Nachbargebieten in die Modellregion gelangen. Voraussetzung ist dabei, dass die beweglichen Wirtsmedien  $k$  mit einer bestimmten Konzentration  $c_k$  mit dieser Substanz belastet sind. Somit ergibt sich der Hintergrundeintrag mittels Wirtsmedium  $k$  in ein Hauptkompartiment  $B_i$ , durch Multiplikation des Volumenstroms des Wirtsmediums  $k$  in dieses Hauptkompartiment  $G_{k \rightarrow i}$  mit der Konzentration der Chemikalie im Wirtsmedium  $c_k$  und es gilt

$$B_i = \sum_k G_{k \rightarrow i} \times c_k \quad 3.54$$

In REMODE werden keine derartigen Hintergrundeinträge für die Hauptkompartimente Boden, Ackerboden und Sediment angenommen. Modelliert wird dagegen ein Hintergrundeintrag in Luft  $B_1$  nach

$$B_1 = G_1 \times C_{e1} \quad 3.55$$

mit  $G_1$  als dem Volumenstrom Luft in [m<sup>3</sup>/h] und  $C_{e1}$  als der Konzentration der UC in einströmender Luft in [mol/m<sup>3</sup>].  $G_1$  berechnet sich dabei über

$$G_1 = \frac{V_1 \times v \times 3600}{\left(A_1 \times \frac{\pi}{4}\right)^{0,5}} \quad 3.56$$

mit  $v$  als der mittleren Windgeschwindigkeit 450 m über Grund in [m/s]. Ferner wird ein Hintergrundeintrag in Wasser  $B_2$  nach

$$B_2 = G_f \times C_{e2} + G_q \times C_{e2k} + G_r \times C_{e2r} \quad 3.57$$

berechnet, mit  $G_f$  als dem Zufluss durch Flüsse aus der Nachbarregion in [ $\text{m}^3/\text{h}$ ],  $C_{e2}$  als der Konzentration der UC in einströmendem Flusswasser in [ $\text{mol}/\text{m}^3$ ],  $G_q$  als Zufluss als Quell-/Exfiltrationswasser in [ $\text{m}^3/\text{h}$ ],  $C_{e2k}$  als der Konzentration der UC in einströmendem Quell-/Exfiltrationswasser in [ $\text{mol}/\text{m}^3$ ],  $G_r$  als dem Zufluss als Regenwasser oberflächenabfluss in [ $\text{m}^3/\text{h}$ ] und  $C_{e2r}$  als der Konzentration der UC in einströmendem Regenwasserabfluss in [ $\text{mol}/\text{m}^3$ ].  $G_q$  ergibt sich dabei über

$$Gq = G2 - Gf - Gk - Gr \quad 3.58$$

mit  $G_2$  als dem Abfluss aus dem Kompartiment Wasser in [ $\text{m}^3/\text{h}$ ],  $G_k$  als dem Zufluss aus Kläranlagen in [ $\text{m}^3/\text{h}$ ].  $G_r$  wird wiederum berechnet nach

$$Gr = (A_3 + A_4) \times U_{ww} - 0,5 \times Gk \quad 3.59$$

### 3.3.2 Advektiver Austrag und Abbau

Dem Mackayschen Fugazitätskonzept folgend, werden den advektiven und pseudoadvektiven Austrägen, sowie den Abbauprozessen ebenfalls charakteristische Transferraten (D-Werte) zugeordnet über deren Berechnung dieses Kapitel Auskunft gibt. Die D-Werte der advektiven Austräge aus den beweglichen Medien Luft  $D_{a1}$  und Wasser  $D_{a2}$  heraus als Massenfluß in Nachbarregionen, werden als Produkte des Volumenstroms Luft  $G_1$  bzw. Wasser  $G_2$  und der jeweiligen Fugazitätskapazität des Hauptkompartimentes Luft  $Z_{b1}$  bzw. Wasser  $Z_{b2}$  errechnet.

Als Verluste durch pseudoadvektive Austräge werden in REMODE drei Transportprozesse bezeichnet: der Austrag von Luft in höhere Luftschichten (Stratosphäre), der Austrag von Wasser aus dem Boden bzw. Ackerboden in das Grundwasser und der Austrag von Sediment als Ablagerung (=verfestigtes Sediment).

Die Berechnung der diesen Prozessen zugehörigen D-Werte ( $D_{s1}$  für Austrag in höhere Luftschichten,  $D_{s3}$  und  $D_{s4}$  für Austräge ins Grundwasser,  $D_{s5}$  für Austrag als Sedimentablagerung ) erfolgt nach

$$D_{s1} = U_s \times A_1 \times Z_{b1} \quad 3.60$$

$$D_{s3} = U_l \times A_3 \times Z_{22} \quad 3.61$$

$$D_{s4} = U_l \times A_4 \times Z_{22} \quad 3.62$$

$$D_{s5} = U_{bx} \times A_5 \times Z_{53} \quad 3.63$$

mit  $U_s$  als der Transferrate in die Stratosphäre in [m/h],  $U_l$  als der Regenwasserversickerungsrate ins Grundwasser in [m/h] und  $U_{bx}$  als der Sedimentablagerungsrate in tiefere Schichten in [m/h].

In REMODE wird angenommen, dass alle Abbauprozesse einer Kinetik erster Ordnung folgen und somit durch ihre Abbauraten (= Geschwindigkeitskonstanten der Einheit 1/h) charakterisiert sind. Die D-Werte der Abbauprozesse in den Hauptkompartimenten  $D_{ri}$  werden folgendermaßen berechnet

$$D_{r1} = k_{r1} \times Z_{11} \times V_1 \quad 3.64$$

$$D_{r2} = k_{r2} \times V_2 \times Z_{22} + k_{r5} \times V_2 \times \phi_{23} \times Z_{23} + k_{rf} \times \phi_{24} \times Z_{24} \quad 3.65$$

$$D_{r3} = k_{r3} \times V_3 \times Z_{b3} \quad 3.66$$

$$D_{r4} = k_{r4} \times V_4 \times Z_{b4} \quad 3.67$$

$$D_{r5} = k_{r5} \times V_5 \times Z_{b5} \quad 3.68$$

mit  $k_{r1}$  als der Abbaurate in Luft in [1/h],  $k_{r2}$  als der Abbaurate in Wasser in [1/h],  $k_{r3}$  als der Abbaurate in Boden in [1/h],  $k_{r4}$  als der Abbaurate in Ackerboden in [1/h],  $k_{r5}$  als der Abbaurate in Sediment in [1/h] und  $k_{rf}$  als der Abbaurate in Fisch in [1/h].

### 3.4 Stoffmengenbilanz

Für jedes der fünf Hauptkompartimente wird eine Gleichung für die Stoffmengenbilanz aus Gewinn und Verlust aufgestellt. Für die Stoffmenge  $n$  wird dabei der Begriff des Inventars  $I$  verwendet. Abgeleitet aus der Definition der Konzentration  $C_i$  als Stoffmenge  $n_i$  pro Volumen  $V_i$  ergibt sich folgende Beziehung zwischen Konzentration  $C_i$  und Inventar  $I_i$ :

$$I_i = C_i \cdot V_i \quad 3.69$$

Für die Änderung des Inventars in dem Hauptkompartiment  $i$  mit der Zeit  $t$  ergibt sich folgende allgemeine Gleichung:

$$\frac{dI_i}{dt} = N_i + B_i - \left[ \sum_{j=1}^5 D_{i \rightarrow j} + Da_i + Dr_i + Ds_i \right] \cdot f_i + \sum_{j=1}^5 [D_{j \rightarrow i} f_j] \quad 3.70$$

Gewinne sind hierbei durch positives, Verluste durch negatives Vorzeichen gekennzeichnet. Da sich das System im Zustand des Fließgleichgewichts befinden soll (Level III), gilt:

$$\text{Gewinne} = \text{Verluste}$$

und somit:

$$\frac{dI_i}{dt} = 0 \quad 3.71$$

Gesucht werden die Fugazitäten  $f_i$  für die Hauptkompartimente  $i$ , aus denen sich die Konzentrationen der Chemikalie errechnen lassen. Letztlich ergeben sich in REMODE für die fünf Hauptkompartimente fünf lineare Gleichungen mit den fünf Unbekannten  $f_1$  bis  $f_5$ .

Aus Gründen der höheren Transparenz werden im Folgenden diese fünf Gleichungen zusammenfassend in Matrix-Schreibweise überführt, so dass die fünf einzelnen Gleichungen in einer Matrixgleichung dargestellt werden können (vgl. [Brüggemann, 1986]).

Die fünf Gleichungen werden folgendermaßen in Vektoren und Matrizen aufgelöst:

$$\begin{array}{l} \text{Komp. (1)} \quad 0 = N_1 + B_1 - \left[ \sum_{j=1}^5 D_{1 \rightarrow j} + Da_1 + Dr_1 + Ds_1 \right] \cdot f_1 + [D_{1 \rightarrow 1} f_1 + D_{2 \rightarrow 1} f_2 + D_{3 \rightarrow 1} f_3 + D_{4 \rightarrow 1} f_4 + D_{5 \rightarrow 1} f_5] \\ \text{Komp. (2)} \quad 0 = N_2 + B_2 - \left[ \sum_{j=1}^5 D_{2 \rightarrow j} + Da_2 + Dr_2 + Ds_2 \right] \cdot f_2 + [D_{1 \rightarrow 2} f_1 + D_{2 \rightarrow 2} f_2 + D_{3 \rightarrow 2} f_3 + D_{4 \rightarrow 2} f_4 + D_{5 \rightarrow 2} f_5] \\ \cdot \\ \cdot \\ \text{Komp. (5)} \quad 0 = N_5 + B_5 - \left[ \sum_{j=1}^5 D_{5 \rightarrow j} + Da_5 + Dr_5 + Ds_5 \right] \cdot f_5 + [D_{1 \rightarrow 5} f_1 + D_{2 \rightarrow 5} f_2 + D_{3 \rightarrow 5} f_3 + D_{4 \rightarrow 5} f_4 + D_{5 \rightarrow 5} f_5] \end{array} \quad 3.72$$

$$\underbrace{\quad}_{\vec{n}} \quad \underbrace{\quad}_{\vec{b}} \quad \underbrace{\quad}_{\hat{D}_0} \quad \underbrace{\quad}_{\hat{K}} \quad \underbrace{\quad}_{\vec{f}} \quad \underbrace{\quad}_{\hat{D} \cdot \vec{f}}$$



Die Matrizen  $\hat{D}_0$ ,  $\hat{K}$  und  $\hat{D}$  bestehen somit aus folgenden Elementen:

Matrix  $\hat{D}_0$

$$\hat{D}_0 = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^5 D_{1 \rightarrow j} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sum_{j=1}^5 D_{2 \rightarrow j} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sum_{j=1}^5 D_{3 \rightarrow j} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sum_{j=1}^5 D_{4 \rightarrow j} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sum_{j=1}^5 D_{5 \rightarrow j} \end{pmatrix} \quad 3.72$$

Matrix  $\hat{K}$

$$\hat{K} = \begin{pmatrix} Da_1 + Dr_1 + Ds_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & Da_5 + Dr_5 + Ds_5 \end{pmatrix} \quad 3.74$$

Matrix  $\hat{D}$

$$\hat{D} = \begin{pmatrix} 0 & D_{2 \rightarrow 1} & D_{3 \rightarrow 1} & D_{4 \rightarrow 1} & D_{5 \rightarrow 1} \\ D_{1 \rightarrow 2} & 0 & D_{3 \rightarrow 2} & D_{4 \rightarrow 2} & D_{5 \rightarrow 2} \\ D_{1 \rightarrow 3} & D_{2 \rightarrow 3} & 0 & D_{4 \rightarrow 3} & D_{5 \rightarrow 3} \\ D_{1 \rightarrow 4} & D_{2 \rightarrow 4} & D_{3 \rightarrow 4} & 0 & D_{5 \rightarrow 4} \\ D_{1 \rightarrow 5} & D_{2 \rightarrow 5} & D_{3 \rightarrow 5} & D_{4 \rightarrow 5} & 0 \end{pmatrix} \cdot \quad 3.75$$

Mit

$$\bar{n} + \bar{b} = \bar{q} \quad 3.76$$

ergibt sich daraus folgende Matrixgleichung:

$$\bar{0} = \bar{q} - \hat{D}_0 \cdot \bar{f} - \hat{K} \cdot \bar{f} + \hat{D} \cdot \bar{f}$$

bzw.

$$-\bar{q} = (\hat{D} - \hat{D}_0 - \hat{K}) \cdot \bar{f} . \quad 3.77$$

Falls die inverse Matrix  $(\hat{D} - \hat{D}_0 - \hat{K})^{-1}$  existiert (Determinante  $\neq 0$ ), ergibt sich durch Multiplikation der Gl. 3.77 mit der inversen Matrix von links

$$-(\hat{D} - \hat{D}_0 - \hat{K})^{-1} \cdot \bar{q} = \bar{f} . \quad 3.78$$

Die fünf Komponenten des Vektors  $\bar{f}$  repräsentieren die Werte der Fugazitäten  $f_i$  der fünf Kompartimente.

$$\bar{f} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \\ f_5 \end{pmatrix} \quad 3.79$$

Aus den Komponenten  $f_1$  bis  $f_5$  des so berechneten Vektors  $\bar{f}$  lässt sich das Inventar  $I_i$  im Kompartiment  $i$  und die Konzentration der Chemikalie  $C_i$  nach folgender Gleichung erhalten:

$$C_i = Zb_i \cdot f_i \quad 3.80$$

wobei  $Zb_i$  die errechnete Fugazitätskapazität des Hauptkompartimentes  $i$  ist. Das Inventar  $I_i$  ergibt sich daraus nach Gl. 3.69.

## 4 Detaillierte Beschreibung der Eingabedaten

### 4.1 Zum Aufbau der Datei Remode.xls

Die Datei Remode.xls ist ein Excel-Arbeitsblatt und besteht aus zwei Datenblättern

- „Eingabe“ und
- „Flussdiagramm“.

#### 4.1.1 „Eingabe“

Das Datenblatt „Eingabe“ enthält sämtliche Eingabedaten die in die Berechnungen einfließen und führt alle Rechenoperationen aus. Verschiedene Farben strukturieren das Datenblatt und kennzeichnen sowohl unterschiedliche Arten von Parametern, als auch Programmebenen unterschiedlicher Struktur.

Mit *violetter* Farbe sind die Zellen unterlegt, die zur Beschreibung der Haupt- und Subkompartimente dienen. Die Daten sind an Baden-Württemberg angepasst. In die *gelb* gefärbten Zellen sind die stoffspezifischen Daten für die jeweilige Umweltchemikalie einzugeben. Die *grau* unterlegten Zellen enthalten speziell an Baden-Württemberg angepasste Daten aus verschiedenen Quellen. Die *blauen* Zellen kennzeichnen das Kläranlagenmodul. *Türkisfarbene* Zellen zeigen die Ergebnisse an.

Für die Eingabeparameter in den Zeilen 37 bis 142 wurde eine von den übrigen Parametern verschiedene Struktur angelegt: Spalte A (Beschreibung) enthält die Parameterbeschreibung; Spalte B (Abkürzung) gibt die für diese Modelldokumentation verwendete Abkürzung des Parameters wieder; Spalte C (Einheit) kennzeichnet die geforderte Einheit; in Spalte D (Eingabe) muss der Anwender seine **manuellen** Eingaben vornehmen, d.h. hier muss die Eingabe von Literaturwerten, persönlichen Schätzwerten udgl. erfolgen; in Spalte E (Formel) erscheinen in Einzelfällen Werte, die über Abschätzfunktionen berechnet werden. Diese geschätzten Werte werden **nur dann** für die Modellierung verwendet, wenn kein Wert in Spalte D eingetragen wurde; in Spalte F (Ersatzwert) finden sich Vorschläge der Autoren die sicherstellen sollen, dass selbst bei sehr ungenügender Datenlage eine Berechnung möglich bleibt. Diese Vorschlagswerte werden deshalb **nur dann** für die Modellierung verwendet, wenn **weder** in Spalte D, **noch** in Spalte E ein Wert angegeben ist. Es existiert also eine Folge abnehmender Prioritäten von

Spalte D zu Spalte F. Welcher Wert letztlich tatsächlich für die Modellierung in REMODE benutzt wird zeigt die Spalte G (verw. Wert)<sup>6</sup>.

#### 4.1.2 „Flussdiagramm“

Das Datenblatt „Flussdiagramm“ zeigt die Stoffflüsse aller in Remode aufgenommen Transfer-, Diffusions-, Abbau-, Aus- und Eintragsprozesse in der Einheit mol/h in einer Graphik entsprechend Abb. 4. Bei den Diffusionsprozessen sind nur die Differenzen der einander entgegengerichteten Stoffflüsse dargestellt.

## 4.2 Substanzspezifische Parameter

Im Folgenden werden die in REMODE benötigten substanzspezifischen Parameter aufgelistet. Darunter verstehen wir nicht nur die Abbaudaten in den verschiedenen Kompartimenten und die physikalisch-chemischen Daten der untersuchten Chemikalie, sondern auch alle Angaben zur Charakterisierung des Emissionsszenarios. Diese Daten sind für das Modellergebnis von größter Bedeutung. Die Autoren empfehlen für jede UC separat eine Sensitivitätsanalyse durchzuführen und dadurch die *empfindlichsten* Parameter zu bestimmen. Wo Abschätzfunktionen für die jeweiligen Parameter oder Hilfen zur Einheitenkonvertierung mitimplementiert wurden, werden diese genannt und mit Quellen belegt.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
37	Abbaurrate in Luft	kr1	[1/h]		0.04080687	0.00E+00	4.08E-02		1.23	
38	Abbaurrate in Wasser	kr2	[1/h]		0.00408069	1.50E-05	4.08E-03		2.23	
39	Abbaurrate in Boden	kr3	[1/h]		0.00126105	1.50E-05	1.26E-03		2.74	
40	Abbaurrate in AckerBoden	kr4	[1/h]		0.00126105	1.50E-05	1.26E-03		2.74	
41	Abbaurrate in Sediment	kr5	[1/h]		0.00040807	1.50E-05	4.08E-04		3.23	
42	Abbaurrate in Fisch	krf	[1/h]	0.00E+00		1.00E-06	0.00E+00			
43	Molmasse der UC	M	[g/mol]	7.81E+01			7.81E+01			
44	Molvolumen der UC	Vm	[cm <sup>3</sup> /mol]	9.60E+01			9.60E+01			
45	Wasserlöslichkeit der UC in mol (25° C)	S(25)	[mol/m <sup>3</sup> ]	2.27E+01			2.27E+01			
46	Dampfdr. der UC (25° C)	P(25)	[Pa]	1.27E+04			1.27E+04			
47	Dampfdr. UC als unterkühlte Schmelze	Psi	[Pa]		5.38E+03	5.85E+03	5.85E+03			
48	Schmelzpunkt der UC	Tm	[K]	2.79E+02			2.79E+02			
49	Siedepunkt der UC	Tb	[K]	3.53E+02		4.00E+02	3.53E+02			
50	Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizient	Kow	[dimlos]	1.40E+02			1.40E+02		2.145 logKow	
51	Lösungsenthalpie	Hs	[J/mol]	1.00E+04		1.00E+04	1.00E+04			
52	Verdampfungsenthalpie	Hv	[J/mol]	3.38E+04	2.97E+04	5.00E+04	3.38E+04			
53	Wasserlöslichkeit der UC in mol (Umgeb.temp.)	S(T)	[mol/m <sup>3</sup> ]		1.81E+01		1.81E+01			
54	Dampfdr. der UC (Umgebungstemp)	P(T)	[Pa]		5.85E+03		5.85E+03			
55	Verteilungskoeffizient für organ. Kohlenst.	Koc	[dimlos]		5.73E+01		5.73E+01			
56	Henrykonstante bei Umgebungstemp.	H(T)	[Pa m <sup>3</sup> /mol]		3.24E+02		3.24E+02		2.51 logH	

Abb.5: Abschnitt des Eingabefeldes für die Abbauraten und die physikalisch-chemischen Parameter der UC in REMODE

<sup>6</sup> Grundsätzlich sind alle Parameter und Gleichungen in REMODE vom Anwender einseh- und veränderbar.

### 4.2.1 Abbauraten

Für folgende Haupt- bzw. Subkompartimente müssen Geschwindigkeitskonstanten des Primärabbaus der UC in der Einheit 1/h in den Zellen D37 – D41 angegeben werden: Abbauraten in Luft  $k_{r1}$ , in Wasser  $k_{r2}$ , im Boden  $k_{r3}$ , im Ackerboden  $k_{r4}$ , in Sediment  $k_{r5}$ , in Fisch/Biota  $k_{rf}$ . Liegen die Abbaudaten als Halbwertszeiten (Half-life [h]) vor, können daraus, unter Annahme einer Abbaukinetik erster Ordnung, Geschwindigkeitskonstanten  $k$  über die Eingabezellen I37 – I41 nach Gleichung

$$k = \frac{0,693}{\text{Half - Life}[h]}$$

berechnet werden.

### 4.2.2 Physikalisch-chemische Parameter

#### Molmasse der UC (M) [g/mol]

Die Molmasse ist für eine Vielzahl von Rechenschritten unentbehrlich. Im Besonderen wird sie für die Berechnung der Massentransferkoeffizienten  $k_{sa}$ ,  $k_{va}$ ,  $k_{vw}$  und des molekularen Diffusionskoeffizienten in Luft  $B_{ma}$  benötigt.

#### Molvolumen der UC (Vm) [cm<sup>3</sup>/mol]

Das Molvolumen wird für die Abschätzung des molekularen Diffusionskoeffizienten in Luft  $B_{ma}$  und in Wasser  $B_{mw}$  benötigt. Das Molvolumen selber kann über die LeBas Inkrement-Methode berechnet werden (s. Lyman et al., 1982).

#### Wasserlöslichkeit der UC in mol bei 25°C (S(25)) [mol/m<sup>3</sup>]

Häufig finden sich in der Literatur Wasserlöslichkeiten die bei einer Temperatur von 25°C gemessen wurden. Da die durchschnittliche Jahrestemperatur in Baden-Württemberg deutlich niedriger liegt ist eine Korrekturrechnung, z.B. via Clausius-Clapeyron notwendig (s.w.u. Parameter S(T)).

#### Dampfdruck der UC bei 25°C (P(25)) [Pa]

Dampfdruck der UC als Reinsubstanz bei 25°C. Analog der Wasserlöslichkeit muss mit diesem Wert eine Temperaturkorrektur durchgeführt werden (s.w.u. Parameter P(T)). Ist die UC bei der gewählten Jahresdurchschnittstemperatur ein Feststoff, so

muss für die Berechnung der Fugazitätskapazität des Subkompartimentes Aerosole  $Z_{13}$  zusätzlich noch der Dampfdruck der unterkühlten Schmelze  $P_{sl}$  bestimmt werden.

#### **Dampfdruck der UC als unterkühlte Schmelze ( $P_{sl}$ ) [Pa]**

Der Dampfdruck der UC als unterkühlte Schmelze (engl. Subcooled liquid) wird ausschließlich für den Fall benötigt, dass die UC ein Festkörper ist ( $T \leq T_m$ ). Dann sollte die Berechnung der Fugazitätskapazität des Subkompartiments Aerosol  $Z_{13}$  mit  $P_{sl}$  durchgeführt werden. Falls  $T > T_m$  wird für die Berechnung von  $Z_{13}$  der Wert  $P(T)$  verwendet (s. Code und Kommentar in den Zellen E47 und F47). Vgl. hierzu Mackay und Paterson, 1991, Shiu und Mackay, 1986, Mackay und Paterson, 1986, Brandes et al., 1996.

#### **Schmelzpunkt der UC ( $T_m$ ) [K]**

$T_m$  wird für die Berechnung des Dampfdrucks der UC als unterkühlte Schmelze benötigt.

#### **Siedepunkt der UC ( $T_b$ ) [K]**

Unter Anwendung der Troutonschen Regel (= für eine große Zahl von Flüssigkeiten findet man nahezu die gleiche molare Verdampfungsentropie von etwa  $85 \text{ JK}^{-1}\text{mol}^{-1}$ ), lässt sich aus der zusätzlichen Kenntnis des Siedepunktes  $T_b$ , die Verdampfungsenthalpie  $H_v$  berechnen.

#### **Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizient ( $K_{ow}$ ) [dim.los]**

Der  $K_{ow}$ -Wert ist ein sehr wichtiger Eingabeparameter. Zum einen wird aus ihm der  $K_{oc}$  abgeschätzt, der wiederum für die Berechnung vieler Fugazitätskapazitäten (Boden-Festsubstanz, Sediment-Festsubstanz, Biota in Wasser) benutzt wird. Zum anderen ist er für viele Expositionsmodellierungsergebnisse ein sehr sensibler Parameter. Aus diesem Grund müssen  $K_{ow}$ -Literaturwerte genau auf Validität der jeweils benutzten Messmethode geprüft werden.

#### **Lösungsenthalpie ( $H_s$ ) [J/mol]**

Die Lösungsenthalpie  $H_s$  wird für die Temperaturkorrektur der Wasserlöslichkeit  $S(T)$  benötigt (vgl. hierzu auch  $P(T)$ ). Als Standardwert ist in Zelle F51 der Wert  $10.000 \text{ J/mol}$  angegeben [Brandes et al., 1996].

**Verdampfungsenthalpie (H<sub>v</sub>) [J/mol]**

Die Verdampfungsenthalpie H<sub>v</sub> wird für die Temperaturkorrektur des Dampfdrucks P(T) nach Clausius-Clapeyron benötigt. Der Wert wird über die Troutonsche Regel aus dem Siedepunkt T<sub>b</sub> berechnet (s.o.). Als Standardwert ist in Zelle F52 der Wert 50.000 J/mol angegeben [Brandes et al., 1996].

**Wasserlöslichkeit der UC in mol bei Umgebungstemp. (S(T)) [mol/m<sup>3</sup>]**

Die Wasserlöslichkeit S(T) dient zusammen mit dem Dampfdruck P(T) der Berechnung der Henrykonstanten H(T). Zur Temperaturkorrektur wird folgende, *Clausius-Clapeyron-ähnliche* Gleichung benutzt (aus Brandes et al., 1996)

$$S(T) = S(25) \times e^{\left[ \frac{H_s}{R} \times \left( \frac{1}{298} - \frac{1}{T} \right) \right]}$$

mit S(T) als der Wasserlöslichkeit der UC bei Umgebungstemperatur T in [Pa], S(25) als der Wasserlöslichkeit der UC bei 25° C in [Pa], H<sub>s</sub> als der Lösungsenthalpie in [J/mol], R als Gaskonstante (8,314) in [Pa m<sup>3</sup>/ mol K] und T als der mittleren Umgebungstemperatur von Baden-Württemberg in [K].

**Dampfdruck der UC bei Umgebungstemp. (P(T)) [Pa]**

Der Dampfdruck P(T) dient zusammen mit der Wasserlöslichkeit S(T) der Berechnung der Henrykonstanten H(T). Zur Temperaturkorrektur wird die Clausius-Clapeyron-Gleichung verwendet

$$P(T) = P(25) \times e^{\left[ \frac{H_v}{R} \times \left( \frac{1}{298} - \frac{1}{T} \right) \right]}$$

mit P(T) als Dampfdruck der UC bei Umgebungstemperatur T in [Pa], P(25) als Dampfdruck der UC bei 25° C in [Pa], H<sub>v</sub> als Verdampfungsenthalpie in [J/mol], R als Gaskonstante (8,314) in [Pa m<sup>3</sup>/ mol K] und T als mittlere Umgebungstemperatur von Baden-Württemberg in [K].

**Verteilungskoeffizient für organischen Kohlenstoff (K<sub>oc</sub>) [dim.los]**

Der K<sub>oc</sub>-Wert dient der Berechnung der Fugazitätskapazitäten Feststoffe im Wasser Z<sub>23</sub>, Boden-Festschubstanz Z<sub>33</sub>, Ackerboden-Festschubstanz Z<sub>44</sub> und Sediment-Festschubstanz Z<sub>53</sub>. Er wird aus dem K<sub>ow</sub>-Wert abgeschätzt über

$$K_{oc} = 0,41 \times K_{ow} .$$

### Henrykonstante bei Umgebungstemp. (H(T)) [Pa m<sup>3</sup>/mol]

Die Henrykonstante H(T) wird zur Berechnung der Fugazitätskapazitäten  $Z_{22}$ ,  $Z_{23}$ ,  $Z_{24}$ ,  $Z_{33}$ ,  $Z_{44}$  und  $Z_{53}$  benötigt. Sie wird aus dem Dampfdruck P(T) und der Wasserlöslichkeit S(T) berechnet nach

$$H(T) = \frac{P(T)}{S(T)}.$$

### 4.2.3 Emissionen und Hintergrundeinträge

	A	B	C	D	E	F	G
28	Emission in Luft	E1	[mol/h]	2.86E+03			2.86E+03
29	Emission in Wasser	E2	[mol/h]	0.00E+00			0.00E+00
30	Emission in Boden	E3	[mol/h]	0.00E+00			0.00E+00
31	Emission in Ackerboden	E4	[mol/h]	0.00E+00			0.00E+00
32	Emission in Sediment	E5	[mol/h]	0.00E+00			0.00E+00
33	Konz. der UC in einströmender Luft	Ce1	[mol/m <sup>3</sup> ]	9.39E-09			9.39E-09
34	Konz. der UC in einström. Flußwasser	Ce2	[mol/m <sup>3</sup> ]	0.00E+00			0.00E+00
35	Konz. der UC in einstr. Quell/Exfiltrationswa.	Ce2k	[mol/m <sup>3</sup> ]	0.00E+00			0.00E+00
36	Konz. der UC in einström. Regenwasserabfluß	Ce2r	[mol/m <sup>3</sup> ]	0.00E+00			0.00E+00

Abb. 6: Abschnitt des Eingabefeldes für die direkten Emissionen und die Hintergrundeinträge durch vorbelastete Luft bzw. vorbelastetes Wasser in die Hauptkompartimente in REMODE.

Emissionen sind in REMODE direkte Einträge in die fünf Hauptkompartimente, sowie Beiträge der biologischen Kläranlage in die Hauptkompartimente Luft, Wasser (die Kläranlagenbeiträge werden gesondert in Kapitel 4.4 behandelt) und Ackerboden. Davon zu unterscheiden sind Hintergrundeinträge durch vorbelastete, in die Region Baden-Württembergs hineinfließende Umweltmedien wie Luft und Wasser.

**Emission in Luft (E1)** [mol/h]

**Emission in Wasser (E2)** [mol/h]

**Emission in Boden (E3)** [mol/h]

**Emission in Ackerboden (E4)** [mol/h]

**Emission in Sediment (E5)** [mol/h]



**Konz. der UC in einströmender Luft (Ce1) [mol/m<sup>3</sup>]**

Die Konzentration der UC in einströmender Luft multipliziert mit dem Volumenstrom  $G_1$  ergibt den Hintergrundeintrag durch Luft  $B_1$ .

**Konz. der UC in einström. Flusswasser (Ce2) [mol/m<sup>3</sup>]**

Die Konzentration der UC in einströmendem Flusswasser multipliziert mit dem Volumenstrom  $G_f$  ergibt *einen* Beitrag zum Hintergrundeintrag durch Wasser  $B_2$ . Der gesamte Hintergrundeintrag durch Wasser  $B_2$  ergibt sich als Summe aus dem Beitrag des einströmenden Flusswassers, geklärten Abwassers<sup>7</sup>, Quell/Exfiltrationswassers sowie des Regenwasserabflusses.

**Konz. der UC in einstr. Quell-/Exfiltrationswasser (Ce2k) [mol/m<sup>3</sup>]**

Die Konzentration der UC in einströmendem Quell-/Exfiltrationswasser multipliziert mit dem Volumenstrom  $G_q$  ergibt *einen* Beitrag zum Hintergrundeintrag durch Wasser  $B_2$ .

**Konz. der UC in einström. Regenwasserabfluss (Ce2r) [mol/m<sup>3</sup>]**

Die Konzentration der UC in einströmendem Regenwasserabfluss multipliziert mit dem Volumenstrom  $G_r$  ergibt *einen* Beitrag zum Hintergrundeintrag durch Wasser  $B_2$ .

### 4.3 Regionalspezifische Parameter

In diesem Kapitel werden alle in REMODE benutzten Regionalparameter aufgelistet. Alle verwendeten Quellen um die Zielregion Baden-Württemberg möglichst gut im Modell wiederzugeben werden dazu ausführlich dokumentiert. Der genauen Beschreibung der vorgenommenen Kläranlagenmodellierung dient ein Sonderkapitel.

---

<sup>7</sup> Geklärtetes Abwasser wird *nur dann* als Teil des Hintergrundeintrags durch Wasser modelliert, falls ein Messwert für die Konzentration der UC im behandelten Abwasser (Zelle D97)  $\neq 0$  eingegeben wird. Andernfalls wird es als Teil der direkten Emission in Wasser  $N_2$  angesetzt (s. auch Kap. 4.4.3).

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1									
2									
3	<b>Daten zu den Bulkkompartimenten</b>		Anteil OC (x <sub>ij</sub> )	Dichte (Rho)	Volumen (V)	Fläche (A)	Tiefe/Höhe (h)		
4			[dim.los]	[kg/m <sup>3</sup> ]	[m <sup>3</sup> ]	[m <sup>2</sup> ]	[m]		
5	Bulkkompartiment (i)	air (1)	xx	1.19	3.60E+13	3.60E+10	1000		
6		water (2)	0.143	1000	5.20E+10	7.10E+08	73.3		
7		soil (3)	0.05	1500	1.31E+09	2.63E+10	0.05		
8		Acker-Boden (4)	0.05	1500	1.81E+09	9.03E+09	0.2		
9		sediment (5)	0.143	1500	2.13E+07	7.10E+08	0.03		
10									
11									
12	<b>Volumenanteile phi ij [dim.los] der Sub- an Bulkkompartimenten</b>		Subkompartiment (j)						
13			air (1)	water (2)	solids (3)	biota (4)			
14	Bulkkompartiment (i)	hent i	air (1)	0	2.00E-11	0			
15		water (2)	0	1	5.00E-06	1.00E-06			
16		soil (3)	0.2	0.3	0.5	0			
17		Acker-Boden (4)	0.2	0.3	0.5	0			
18		sediment (5)	0	0.822	0.178	0			
19									
20	<b>Dichte (Subkompartiment) [kg/m<sup>3</sup>]</b>		1.19	1000	2.40E+03	1000			

In diesen violettfarbenen Zellen können, falls gewünscht, entsprechende Werte zur Beschreibung der Kompartimente geändert werden. In Zelle C16, C17 und E7, E8 darf nicht Null stehen

Abb. 7: Abschnitt des Eingabefeldes für die Charakterisierung der Haupt- und Subkompartimente in REMODE.

### Anteil OC (x<sub>ij</sub>) [dim.los]

Dieser Wert gibt den Anteil organischen Kohlenstoffs in den Festbestandteilen des Hauptkompartiments an. Der Anteil für die Festbestandteile des Wasserkompartiments beträgt hierbei 0,143 und wurde aus LfU, 1992 entnommen. Derjenige für das Boden- und Ackerbodenkompartiment wurde nach Brandes et al., 1996 zu 0,05 angegeben. Für die Festbestandteile des Sedimentkompartiments wurde der in LfU, 1992 mit 0,143 angegebene Wert verwendet.

### Dichte (Rho) [kg/m<sup>3</sup>]

Der verwendete Wert für Luft von 1,19 kg/m<sup>3</sup> stammt aus Mackay und Paterson, 1991, die Werte für Wasser von 1000 kg/m<sup>3</sup>, für Boden, Ackerboden und Sediment von jeweils 1500 kg/m<sup>3</sup> wurden alle aus Brandes et al., 1996 entnommen.

### Volumen (V) [m<sup>3</sup>]

Das Volumen des jeweiligen Hauptkompartiments wird rechnerisch aus größtenteils Literaturwerten nach

$$V = A \times h$$

mit  $A$  als der Fläche des Kompartiments in [m<sup>2</sup>] und  $h$  als der Tiefe/Höhe des Kompartiments in [m] ermittelt. Eine Ausnahme bildet die Berechnung des Volumens des Wasserkompartiments, da für die Tiefe in Baden-Württemberg kein Literaturwert gefunden werden konnte.

Das Gesamtvolumen für das Wasserkompartiment  $V_2$  wurde daher folgendermaßen berechnet: Nach Britannica, 2000 beträgt die Tiefe des Bodensees im Schnitt 90 m, mit der Bodenseefläche<sup>8</sup> ergibt sich somit ein Volumen von  $5,1 \times 10^{10} \text{ m}^3$ . Als durchschnittliche Seetiefe in Baden-Württemberg wurde 10 m angenommen, mit einer See-Gesamtfläche von  $8,6 \text{ km}^2$  [SLA, 1999] ergibt sich ein Volumen von  $8,6 \times 10^7 \text{ m}^3$ . Die durchschnittliche Tiefe der Wasserläufe in Baden-Württemberg wurde von den Autoren zu 4 m angesetzt und mit einer Gesamtfläche der Wasserläufe von  $129,7 \text{ km}^2$  (Berechnung siehe unter "Fläche") ein Volumen von  $5,2 \times 10^8 \text{ m}^3$  errechnet. Durch Addition der Einzelvolumina ergibt sich somit das Gesamtvolumen des Wasserkompartiments zu  $5,2 \times 10^{10} \text{ m}^3$ . Für die Volumina der anderen Hauptkompartimente ergeben sich die Werte von  $3,6 \times 10^{13} \text{ m}^3$  für Luft, von  $1,31 \times 10^9 \text{ m}^3$  für Boden, von  $1,81 \times 10^9 \text{ m}^3$  für Ackerboden und von  $2,13 \times 10^7 \text{ m}^3$  für Sediment.

### **Fläche (A) [m<sup>2</sup>]**

Für Luft entspricht der verwendete Wert von  $3,60 \times 10^{10} \text{ m}^2$  (=36037,75 km<sup>2</sup>) der Landesfläche von Baden-Württemberg zuzüglich der Bodenseefläche [SLA, 1999]. Die Wasserfläche in Baden-Württemberg von  $7,10 \times 10^8 \text{ m}^2$  wurde ermittelt aus der Gesamtfläche der Wasserläufe zuzüglich der Gesamtfläche der Seen (einschließlich Bodensee). Die Gesamtfläche der Wasserläufe wurde durch Multiplikation der in der Literatur [SLA, 1999] angegebenen Längen der Wasserläufe mit einer von den Autoren geschätzten Standardbreite von 0,05 km (Fläche Wasserläufe somit  $129,7 \text{ km}^2$ ) berechnet. Für die Gesamtfläche der Seen (einschließlich Bodensee) ergab sich  $580,12 \text{ km}^2$  [SLA, 1999]. Die Bodenfläche von  $2,63 \times 10^{10} \text{ m}^2$  ergibt sich aus der Fläche Luft abzüglich der Flächen für Wasser und Ackerboden. Der für die Ackerbodenfläche verwendete Wert von  $9,03 \times 10^9 \text{ m}^2$  entspricht der Summe aus Ackerland, Gartenland, Rebland und Obstanlagen in Baden-Württemberg [SBA, 1999]. Die Sedimentfläche entspricht der ermittelten Wasserfläche.

### **Tiefe/Höhe (h) [m]**

Für die Höhe des Luftkompartiments wurde der von Brandes et al., 1996 angegebene Wert von 1000 m als mittlere Höhe der Luftschicht verwendet. Die Berechnung der durchschnittlichen Tiefe des Wasserkompartiments von 73,3 m erfolgte aus den bereits bekannten Werten für Volumen und Fläche des Wasserkompartiments.

---

<sup>8</sup> Da der Einfluss des Bodensees auf die Wasserbilanz Baden-Württembergs elementar ist, haben die Autoren den Bodensee als vollständig der Zielregion Baden-Württemberg zugehörig modelliert.

Mit 0,05 m als Tiefe des Bodenkompartmentes und 0,2 m als Tiefe des Ackerbodenkompartiments wurden die in EUSES [Brandes et al., 1996] angegebenen Standardwerte übernommen. Für die Tiefe des Sedimentkompartiments wurde ebenfalls der in Brandes et al., 1996 angegebene Wert von 0,03 m verwendet.

### Volumenanteile $\phi_{in}$ der Subkompartimente n am jeweiligen

#### Hauptkompartiment i [dim.los]

Für das Kompartiment Luft wurde der Anteil Aerosole nach Mackay und Paterson, 1991 zu  $2,00 \times 10^{-11}$  angenommen. Für das Kompartiment Wasser wurden mit einem Anteil suspendiertes Sediment von  $5,0 \times 10^{-6}$  und einem Biota-Anteil von  $1,00 \times 10^{-6}$  ebenfalls Werte aus Mackay und Paterson, 1991 verwendet. Für die Kompartimente Boden und Ackerboden wurde nach Brandes et al., 1996 der Luftanteil auf 0,2, der Wasseranteil auf 0,3 und der Feststoffanteil auf 0,6 festgesetzt. Für das Kompartiment Sediment wurde der Wasseranteil zu 0,822 und der Feststoffanteil zu 0,178 angenommen [LfU, 1992].

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
58	mittl. Umgebungstemp. von BW	T	[K]	2.82E+02			2.82E+02			
59	mittl. Windgeschwindigkeit in 450 m ü. Gr.	v	[m/s]	5.80E+00			5.80E+00			
60	mittl. Windgeschwindigkeit in 10 m ü. Gr.	v10	[m/s]	2.90E+00			2.90E+00			
61	Volumenstrom Luft	G1	[m³/h]		4.47E+12		4.47E+12			
62	Abfluß aus dem Kompart. Wasser	G2	[m³/h]	5.56E+06	5.56E+06		5.56E+06			
63	Zufluß durch Flüsse aus Nachbarregion	Gf	[m³/h]	3.77E+06			3.77E+06			
64	Zufluß als Quell-/Exfiltrationswasser	Gq	[m³/h]		3.95E+05		3.95E+05			
65	Zufluß als Regenwasser oberflächenabfluß	Gr	[m³/h]		1.24E+06		1.24E+06			
66	Zufluß aus Kläranlagen	Gk	[m³/h]	1.59E+05			1.59E+05			
67	Gehalt der Lipide in Fisch	xL	[dim.los]	5.00E-02		4.80E-02	5.00E-02			
68	Verlustrate durch Ackerbodenerosion	Usw	[m/h]	3.42E-09		2.30E-08	3.42E-09			
69	Verlustrate durch Bodenerosion	Usw	[m/h]	0.00E+00		2.30E-08	0.00E+00			
70	Massentransferkoeffizient Luft/Boden	Ksa	[m/h]		1.67E+01	1.00E+00	1.67E+01			
71	Massentransferkoeffizient Wasser/Sed.	Kyw	[m/h]	1.00E-02		1.00E-02	1.00E-02			
72	Massentransferkoeffizient Luft/Wasser	Kva	[m/h]		1.67E+01	3.00E+00	1.67E+01			
73	Massentransferkoeffizient Wasser/Luft	Kww	[m/h]		1.29E-02	3.00E-02	1.29E-02			
74	Sedimentdepositionsrate	Udx	[m/h]	2.93E-06		4.60E-08	2.93E-06			
75	Sedimentresuspensionsrate	Urx	[m/h]	2.51E-06		1.10E-08	2.51E-06			
76	Sedimentablagerungsrate in tiefere Schicht.	Ubx	[m/h]	4.18E-07		3.40E-08	4.18E-07			
77	Diffusionstiefe in Boden	Y3	[m]	5.00E-02		5.00E-02	5.00E-02			
78	Diffusionstiefe in AckerBoden	Y4	[m]	5.00E-02		5.00E-02	5.00E-02			
79	Diffusionstiefe in Sediment	Y5	[m]	2.00E-02		5.00E-03	2.00E-02			
80	Verhältnis Luftsäule/Regentropfenvolumen	Q	[dim.los]	2.00E+05		2.00E+05	2.00E+05			
81	Absinkgeschwindigkeit von Aerosolpartikeln	Up	[m/h]	1.08E+01		1.08E+01	1.08E+01			
82	Transferrate in Stratosphäre	Us	[m/h]	1.00E-02		1.00E-02	1.00E-02			
83	molekularer Diffusionskoeffizient in Luft	Bma	[m²/h]		2.86E-02	4.00E-02	2.86E-02			
84	molekularer Diffusionskoeffizient in Wasser	Bmw	[m²/h]		2.41E-06	4.00E-06	2.41E-06			
85	Regenwasserabflußrate	Uww	[m/h]		3.72E-05	3.90E-05	3.72E-05			
86	Regenwasser versickerungsrate ins Grundw.	Ul	[m/h]		1.60E-05	3.90E-05	1.60E-05			
87	Regenrate	Uq	[m/h]	1.06E-04		9.70E-05	1.06E-04			

Die grau unterlegten Felder in der Spalte "Eingabe" (Spalte D) u. z. T. in der Spalte "Formel" (Spalte E) enthalten speziell für Baden-Württemberg ausgewählte Daten sowie angepaßte Daten aus verschiedenen Quellen. Bei Bedarf können diese geändert werden.

Abb. 8: Abschnitt des Eingabefeldes für die regionalspezifischen Parameter (ohne Kläranlage) in REMODE.

#### Dichte (Subkompartiment) [kg/m³]

Die verwendeten Werte von  $1,19 \text{ kg/m}^3$  für das Subkompartiment Luft, von  $1000 \text{ kg/m}^3$  für das Subkompartiment Wasser, von  $2,40 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$  für das Subkompartiment Feststoffe im Boden/Ackerboden und von  $1000 \text{ kg/m}^3$  für das

Subkompartiment aquatische Biota wurden alle aus Mackay und Paterson, 1991 entnommen.

**Mittlere Umgebungstemperatur von BW (T) [K]**

Der verwendete Wert von 282,15 K entspricht der in der Literatur für Deutschland angegebenen Jahresdurchschnittstemperatur [SBA, 1999].

**Mittlere Windgeschwindigkeit in 10 m (v10) und in 450 m über Grund (v) [m/s]**

Die Daten zur mittleren Windgeschwindigkeit in Baden-Württemberg von 4,3 m/s in einer Höhe von 10 m und von 5,8 m/s (skalares Mittel) in einer Höhe von 450 m über Grund wurden uns vom Deutschen Wetterdienst zur Verfügung gestellt.

**Volumenstrom Luft (G1) [m³/h]**

Dieser bezeichnet den Luftstrom, der in das Hauptkompartiment Luft ein- bzw. ausströmt. Der verwendete Wert von  $3,86 \times 10^{12}$  m³/h ergibt sich aus der in Kapitel 3.3.1 für die Berechnung von G1 angegebenen Gl. 3.56.

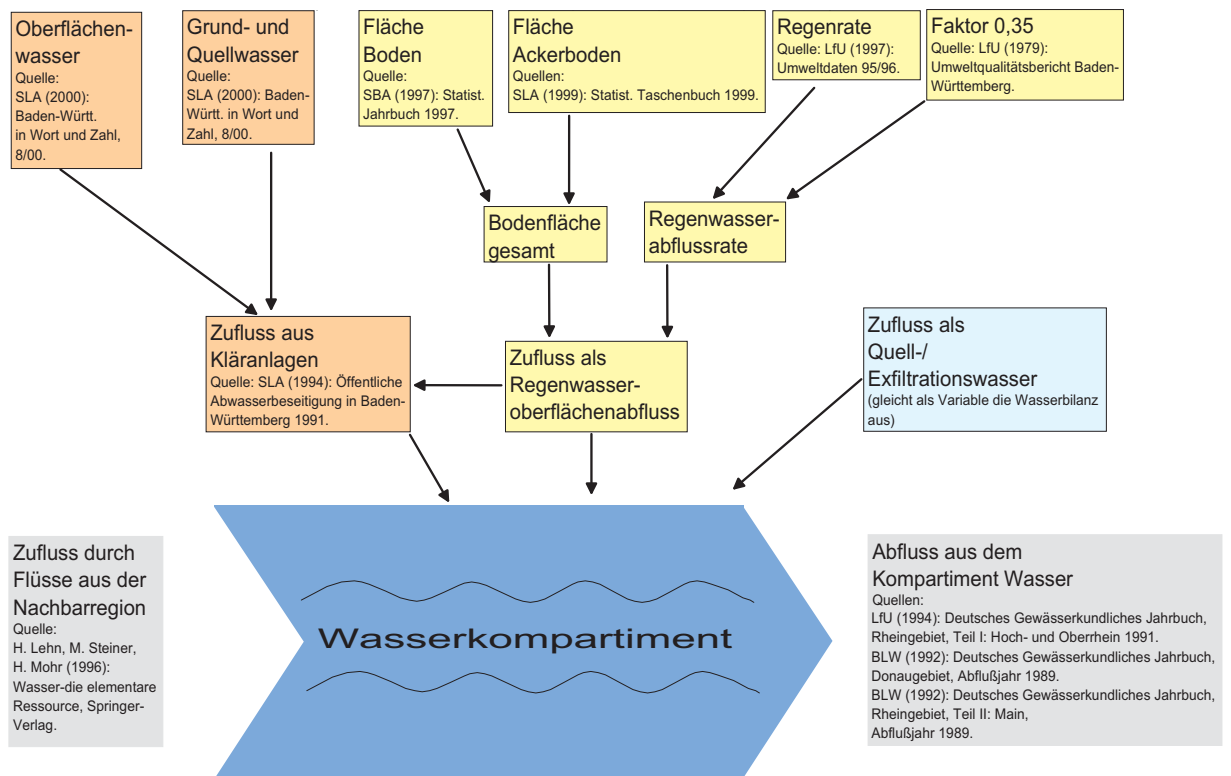


Abb. 9: Veranschaulichung der in REMODE verwendeten Wasserbilanz für Baden-Württemberg.

**Abfluss aus dem Kompartiment Wasser (G2) [m<sup>3</sup>/h]**

Der verwendete Wert von  $5,56 \times 10^6$  m<sup>3</sup>/h wurde durch Addition der in der Literatur angegebenen Mengen von 1410 m<sup>3</sup>/s für den Rheinabfluss, von 125 m<sup>3</sup>/s für den Donau- und 9,3 m<sup>3</sup>/s für den Tauber-/Erfaabfluss [LfU, 1994; BLW, 1992; BLW, 1992a] berechnet.

**Zufluss durch Flüsse aus Nachbarregion (Gf) [m<sup>3</sup>/h]**

Flusswasser strömt durch die Flüsse Rhein und Iller in das Wasserkompartiment ein. In der Literatur wird der Gesamtzufluss durch die beiden genannten Flüsse mit  $3,77 \times 10^6$  m<sup>3</sup>/h angegeben [Lehn, 1996].

**Zufluss als Quell- /Exfiltrationswasser (Gq) [m<sup>3</sup>/h]**

Der Zufluss als Quell-/Exfiltrationswasser umfasst vormals versickertes Regenwasser, welches nun als Quellwasser bzw. durch Exfiltration direkt wieder in Bäche und Flüsse einströmt (ohne den Umweg über die Kläranlage zu nehmen).

Der verwendete Wert von  $3,95 \times 10^5$  m<sup>3</sup>/h gleicht als Variable die Wasserbilanz aus. Er wurde aus dem für den Abfluss aus dem Wasserkompartiment ermittelten Wert abzüglich der Summe der übrigen Zuflüsse berechnet.

**Zufluss als Regenwasseroberflächenabfluss (Gr) [m<sup>3</sup>/h]**

Erfasst wird der oberirdische Regenwasserabfluss, welcher von der Bodenoberfläche direkt in das Wasserkompartiment (ohne den Umweg über die Kläranlage)<sup>9</sup> einfließt. Der Wert wurde rechnerisch nach der in Kapitel 3.3.1 genannten Gl. 3.59 aus den Werten für die Fläche des Boden- und Ackerbodenkompartiments ( $A_3$ ,  $A_4$ ), der Regenwasserabflussrate ( $U_{ww}$ ) und dem Zufluss aus Kläranlagen ( $G_k$ ) ermittelt.

**Zufluss aus Kläranlagen (Gk) [m<sup>3</sup>/h]**

Hier wird die Menge an geklärtem Abwasser, welches in Vorfluter und somit in das Hauptkompartiment Wasser eingeleitet wird, erfasst. Es wurde der Wert  $1,59 \times 10^5$  m<sup>3</sup>/h verwendet [SLA, 1994].

---

<sup>9</sup> Ca. 50% des Kläranlagenzuflusses stammt aus dem Regenwasseroberflächenabfluss [Lehn, 1996].

Um diesen nicht doppelt zu werten, muss er bei der Berechnung von Gr abgezogen werden.

**Gehalt der Lipide in Fisch (xL) [dim.los]**

Für den Gehalt der Lipide in Fisch wurde der in Brandes et al., 1996 genannte Wert von  $5,00 \times 10^{-2}$  verwendet.

**Verlustrate durch Ackerbodenerosion (Usw) [m/h]**

Es wurde der in Brandes et al., 1996 für die Erosion landwirtschaftlich genutzter Flächen angegebene Wert von 03 mm/a verwendet.

**Verlustrate durch Bodenerosion (Usw) [m/h]**

Für Boden wurde keine Erosion angenommen [Uni Hohenheim].

**Massentransferkoeffizienten  $K_{sa}$  (Luft/Boden),  $K_{yw}$  (Wasser/Sediment),  $K_{va}$  (Luft/Wasser) und  $K_{vw}$  (Wasser/Luft) [m/h]**

Die Massentransferkoeffizienten  $K_{sa}$ ,  $K_{va}$  und  $K_{vw}$  wurden nach den bereits in Kapitel 3.2.1 genannten Formeln berechnet. Für  $K_{yw}$  wurde der in Brandes et al., 1996 angegebene Wert von 0,01 m/h eingesetzt.

**Sedimentdepositionsrate ( $U_{dx}$ ), Sedimentresuspensionsrate ( $U_{rx}$ ) und Sedimentablagerungsrate in tiefere Schichten ( $U_{bx}$ ) [m/h]**

Die einzelnen Sedimentdepositionsprozesse stehen zueinander in folgender Beziehung:

$$U_{dx} = U_{rx} + U_{bx}$$

Die für  $U_{rx}$  und  $U_{bx}$  verwendeten Werte von  $2,51 \times 10^{-6}$  m/h und  $4,18 \times 10^{-7}$  m/h wurden unter Verwendung von Werten für Baden-Württemberg nach Brandes et al., 1996 berechnet.

**Diffusionstiefe in Boden (Y3), Ackerboden (Y4) und Sediment (Y5) [m]**

Für die eingesetzten Werte von 0,05 m für Boden und Ackerboden und 0,02 m für Sediment wurden die in Brandes et al., 1996 angegebenen Werte verwendet.

**Verhältnis Luftsäule/Regentropfenvolumen (Q) [dim.los]**

Verwendet wurde der in Mackay, 1991 angegebene Wert von  $2,00 \times 10^5$ .

**Absinkgeschwindigkeit von Aerosolpartikeln ( $U_p$ ) [m/h]**

Verwendet wurde der in Mackay und Paterson, 1991 angegebene Wert von 0,3 cm/s.

**Transferrate in die Stratosphäre ( $U_s$ ) [m/h]**

Verwendet wurde der in Mackay et al., 1985 angegebene Wert von 0,01 m/h (90 m/a). Dieser resultiert aus der Annahme einer Residenzzeit der Luft in der Troposphäre von 67 Jahren und eines normierten Luftvolumens der Troposphäre von 6000 Metern ( $6000\text{m}/67\text{a}=90\text{m/a}$ ).

**Molekulare Diffusionskoeffizient in Luft ( $B_{ma}$ ) und Wasser ( $B_{mw}$ ) [ $\text{m}^2/\text{h}$ ]**

Diese beiden Größen wurden nach den in Kapitel 3.2.2 vorgestellten Formeln nach Chiao et al., 1994 errechnet.

**Regenwasserabflussrate ( $U_{ww}$ ) [m/h]**

Da durchschnittlich 35% des Niederschlagswassers als Oberflächenabfluss abgeführt werden [LfU, 1979] beträgt die Regenwasserabflussrate 35% der Regenrate.

**Regenwasserversickerungsrate ins Grundwasser ( $U_I$ ) [m/h]**

Die Regenwasserversickerungsrate beträgt 15% der Regenrate [LfU, 1979].

**Regenrate ( $U_q$ ) [m/h]**

Die Regenrate wurde aus LfU, 1997 abgeschätzt.



## 5 Modellierung des Verhaltens in einer biologischen Kläranlage

### 5.1 Allgemeines Vorgehen

Aufgrund des hohen Anschlussgrades von Industrieanlagen und öffentlichen Haushalten an Kläranlagen in Baden-Württemberg, ist die Mitmodellierung des Einflusses von Kläranlagen in REMODE unerlässlich. Wegen der ungenügenden Datenlage über das Abbauverhalten von Substanzen in Kläranlagen ist dabei die Verwendung eines Kläranlagenmodells notwendig. Die Autoren entschieden sich für das in den TGDs [EC, 1996] beschriebene Vorgehen:

Liegen keine Messwerte (Gehalt der UC in Klärschlamm usw.) vor, wird ein Kläranlagenmodell zur Abschätzung des Abbau- und Transportverhaltens benutzt, das drei substanzspezifische Daten als Eingabewerte benötigt:

1. den dekadischen Logarithmus des Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizienten  $\log K_{OW}$
2. den dekadischen Logarithmus des Henrykoeffizienten  $\log H$  und
3. das Ergebnis eines Bioabbaubarkeitstests nach den OECD-Richtlinien [OECD, 1997].

Das in den TGDs verwendete Kläranlagenmodell SimpleTreat 3.0 [Struijs, 1996] stellt wie REMODE ein Level III Multimedia-Kompartimentmodell dar und besteht im Wesentlichen aus einem Vorklärbecken, einem Belebtschlammreaktor und einem Nachklärbecken mit den charakteristischen mittleren Verweilzeiten von 9,2 Tagen für die Schlammverweilzeit und 6,9 Stunden für die hydraulische Verweilzeit. In Abhängigkeit vom Ergebnis des Bioabbaubarkeitstests wird der betrachteten Substanz eine Geschwindigkeitskonstante (0, 0,1 0,3 oder  $1 \text{ h}^{-1}$ ) zugeordnet unter Annahme einer Bioabbaukinetik erster Ordnung. Für diese vier Fälle sind die Ergebnisse des Kläranlagenmodells – in Abhängigkeit von  $\log K_{OW}$  und  $\log H$  in den TGDs tabellarisch wiedergegeben. Sind somit die oben genannten drei Eingabewerte bekannt, kann man aus den in den Tab. 1– 4 wiedergegebenen Informationen folgende prozentualen Angaben ablesen:

- den durch den Kläranlagenprozess in die Luft emittierten Anteil (% to air)

- den durch den Kläranlagenprozess über den Klärschlamm emittierten Anteil (% to sludge)
- den durch den Kläranlagenprozess über das geklärte Abwasser emittierten Anteil (% to water)
- den durch den Kläranlagenprozess abgebauten Anteil (% degraded)

Für die Modellierung in REMODE sind die so erhaltenen prozentualen Angaben allein nicht ausreichend da vielmehr die genauen Stoffflüsse in mol/h benötigt werden. Aus diesem Grund sind je nach Aufgabenstellung weitere Angaben notwendig, wie in den folgenden Beispielen kurz erläutert wird.

Beispiel 1 – Emissionsszenarien werden durchgespielt (s. Kap. 5.1)

In diesem Fall werden verschiedene Stoffflüsse der betrachteten Chemikalie für den Fluss belasteten Abwassers in die Kläranlage hinein angenommen. Somit lassen sich aus den obigen prozentualen Angaben problemlos die resultierenden Stoffflüsse aus der Kläranlage heraus berechnen.

Beispiel 2 – Eine Validierung bzgl. eines ausgewählten Stoffes wird angestrebt

Sind Angaben zur Emission in die Kläranlage unbekannt (sonst s. Bsp. 1), *muss* auf einen durchschnittlichen Messwert im Klärschlamm, Kläranlagenabfluss o.ä. zurückgegriffen werden. In Kombination mit den prozentualen Angaben lassen sich damit alle kläranlagenspezifischen Stoffflüsse rückrechnen.

With primary sedimentation; sludge loading rate = 0.15 kg BOD/kg dry matter/d (sludge retention time = 9.2 d, hydraulic retention time = 6.9 hr)

No biodegradability (kdeg = 0 hr<sup>-1</sup>)

		log H									
	% to air	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
log K <sub>ow</sub>	0	0	0	0	0	2	15	64	91	95	95
	1	0	0	0	0	2	15	64	91	95	95
	2	0	0	0	0	2	15	64	91	94	94
	3	0	0	0	0	2	13	58	84	87	87
	4	0	0	0	0	1	7	33	54	57	57
	5	0	0	0	0	0	1	8	22	26	26
	6	0	0	0	0	0	0	1	5	6	7
		log H									
	% to water	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
log K <sub>ow</sub>	0	100	100	100	100	98	85	36	9	5	5
	1	100	100	100	100	98	85	36	9	5	5
	2	99	99	99	99	97	84	35	8	5	5
	3	89	89	89	89	87	76	33	8	5	5
	4	47	47	47	47	46	42	22	6	4	4
	5	14	14	14	14	14	14	11	6	4	4
	6	9	9	9	9	9	9	8	7	7	7
		log H									
	% to sludge	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
log K <sub>ow</sub>	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	3	11	11	11	11	11	11	9	8	8	8
	4	53	53	53	53	53	52	46	40	39	39
	5	86	86	86	86	86	85	81	72	70	69
	6	91	91	91	91	91	91	91	88	87	86
		log H									
	% degraded	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
log K <sub>ow</sub>	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
		log H									
	% removal	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
log K <sub>ow</sub>	0	0	0	0	0	2	15	64	91	95	95
	1	0	0	0	0	2	15	64	91	95	95
	2	1	1	1	1	3	16	65	92	95	95
	3	11	11	11	11	13	24	67	92	95	95
	4	53	53	53	53	54	58	78	94	96	96
	5	86	86	86	86	86	86	89	94	96	96
	6	91	91	91	91	91	91	92	93	93	93

Tab. 1: Ergebnisse des Kläranlagenmodells Simple Treat 3.0 [Struijs, 1996] in Abhängigkeit von log K<sub>OW</sub> und log H der modellierten Substanz für eine Geschwindigkeitskonstante von 0 h<sup>-1</sup> (= Substanz ist nicht biologisch abbaubar).

With primary sedimentation; sludge loading rate = 0.15 kg BOD/kg dry matter/d (sludge retention time = 9.2 d, hydraulic retention time = 6.9 hr)

Inherent biodegradability (kdeg = 0.1 hr<sup>-1</sup>)

		log H									
	% to air	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
log K <sub>ow</sub>	0	0	0	0	0	1	10	50	85	91	91
	1	0	0	0	0	1	10	50	85	91	91
	2	0	0	0	0	1	10	50	85	90	90
	3	0	0	0	0	1	9	46	78	83	84
	4	0	0	0	0	1	5	27	50	54	55
	5	0	0	0	0	0	1	7	21	25	25
	6	0	0	0	0	0	0	1	4	6	7
		log H									
	% to water	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
log K <sub>ow</sub>	0	59	59	59	59	58	52	28	8	5	5
	1	59	59	59	59	58	52	28	8	5	5
	2	59	59	59	58	58	52	27	8	5	5
	3	54	54	54	54	53	47	25	7	5	4
	4	32	32	32	32	31	29	17	6	4	4
	5	13	13	13	13	13	12	10	6	4	4
	6	9	9	9	9	9	9	8	7	7	7
		log H									
	% to sludge	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
log K <sub>ow</sub>	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	3	10	10	10	10	10	10	9	8	8	8
	4	48	48	48	48	48	48	44	40	39	39
	5	83	83	83	83	83	83	79	72	70	69
	6	91	91	91	91	91	91	90	88	86	86
		log H									
	% degraded	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
log K <sub>ow</sub>	0	41	41	41	41	41	38	22	7	4	4
	1	41	41	41	41	40	38	22	7	4	4
	2	40	40	40	40	40	38	22	7	4	4
	3	37	37	37	37	36	34	20	6	4	4
	4	20	20	20	20	20	19	12	4	3	2
	5	4	4	4	4	4	4	3	2	1	1
	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
		log H									
	% removal	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
log K <sub>ow</sub>	0	41	41	41	41	42	48	72	92	95	95
	1	41	41	41	41	42	48	72	92	95	95
	2	41	41	41	42	42	48	73	92	95	95
	3	46	46	46	46	47	53	75	93	95	96
	4	68	68	68	68	69	71	83	94	96	96
	5	87	87	87	87	87	88	90	94	96	96
	6	91	91	91	91	91	91	92	93	93	93

Tab. 2: Ergebnisse des Kläranlagenmodells SimpleTreat 3.0 [Struijs, 1996] in Abhängigkeit von log K<sub>OW</sub> und log H der modellierten Substanz für eine Geschwindigkeitskonstante von 0,1 h<sup>-1</sup> (= Substanz ist inhärent biologisch abbaubar).

With primary sedimentation; sludge loading rate = 0.15 kg BOD/kg dry matter (sludge retention time = 9.2 d, hydraulic retention time = 6.9 hr)

Ready biodegradability, 10 day window criterion is not fulfilled ( $k_{deg} = 0.3 \text{ hr}^{-1}$ )

		log H									
	% to air	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
log $K_{ow}$	0	0	0	0	0	1	6	36	76	84	85
	1	0	0	0	0	1	6	36	76	84	85
	2	0	0	0	0	1	6	35	75	83	84
	3	0	0	0	0	1	6	32	69	77	78
	4	0	0	0	0	0	3	20	45	50	51
	5	0	0	0	0	0	1	6	19	23	24
	6	0	0	0	0	0	0	1	4	6	6
		log H									
	% to water	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
log $K_{ow}$	0	33	33	33	33	32	29	19	7	5	4
	1	33	33	33	32	32	29	19	7	5	4
	2	32	32	32	32	29	19	7	5	4	4
	3	30	30	30	30	27	18	7	4	4	4
	4	19	19	19	19	18	12	5	3	3	3
	5	10	10	10	10	10	9	5	4	4	4
	6	8	8	8	8	8	8	7	7	7	7
		log H									
	% to sludge	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
log $K_{ow}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	3	9	9	9	9	9	9	9	8	8	8
	4	45	45	45	44	44	44	42	40	39	39
	5	80	80	80	80	80	79	77	71	69	69
	6	90	90	90	90	90	90	90	87	86	86
		log H									
	% degraded	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
log $K_{ow}$	0	67	67	67	67	67	64	45	17	12	11
	1	67	67	67	67	67	64	45	17	12	11
	2	67	67	67	67	66	64	45	17	11	11
	3	61	61	61	61	61	58	41	16	11	10
	4	36	36	36	36	36	35	25	10	7	7
	5	10	10	10	10	10	10	8	5	3	3
	6	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
		log H									
	% removal	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
log $K_{ow}$	0	67	67	67	67	68	71	81	93	95	96
	1	67	67	67	68	68	71	81	93	95	96
	2	68	68	68	68	68	71	81	93	95	96
	3	70	70	70	70	70	73	82	93	96	96
	4	81	81	81	81	81	82	88	95	97	97
	5	90	90	90	90	90	90	91	95	96	96
	6	92	92	92	92	92	92	92	93	93	93

Tab. 3: Ergebnisse des Kläranlagenmodells SimpleTreat 3.0 [Struijs, 1996] in Abhängigkeit von log  $K_{ow}$  und log H der modellierten Substanz für eine Geschwindigkeitskonstante von  $0,3 \text{ h}^{-1}$  (= Substanz ist biologisch abbaubar, erfüllt aber nicht das 10 Tage-Kriterium des MITI I-Tests).

With primary sedimentation; sludge loading rate = 0.15 kg BOD/kg dry matter/d (sludge retention time = 9.2 d, hydraulic retention time = 6.9 hr)

Ready biodegradability ( $k_{deg} = 1 \text{ hr}^{-1}$ )

		log H									
	% to air	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
log $K_{ow}$	0	0	0	0	0	0	3	19	55	66	68
	1	0	0	0	0	0	3	19	55	66	68
	2	0	0	0	0	0	3	19	54	66	67
	3	0	0	0	0	0	3	17	50	61	62
	4	0	0	0	0	0	2	11	32	40	41
	5	0	0	0	0	0	1	4	15	19	20
	6	0	0	0	0	0	0	1	4	5	6
		log H									
	% to water	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
log $K_{ow}$	0	13	13	13	13	13	12	9	5	4	3
	1	13	13	13	13	13	12	9	5	4	3
	2	13	13	13	13	12	12	9	5	4	3
	3	12	12	12	12	12	11	8	5	3	3
	4	8	8	8	8	8	8	6	4	3	3
	5	7	7	7	7	7	7	6	4	4	3
	6	8	8	8	8	8	8	7	7	7	6
		log H									
	% to sludge	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
log $K_{ow}$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	3	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8
	4	41	41	41	41	41	41	40	39	39	39
	5	73	73	73	73	73	73	72	69	68	68
	6	88	88	88	88	88	88	88	86	85	85
		log H									
	% degraded	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
log $K_{ow}$	0	87	87	87	87	87	85	72	41	30	29
	1	87	87	87	87	87	85	72	40	30	29
	2	87	87	87	86	86	84	71	40	30	29
	3	80	80	80	80	80	78	66	37	28	27
	4	51	51	51	51	51	50	43	25	18	18
	5	20	20	20	20	20	20	18	12	9	9
	6	4	4	4	4	4	4	4	3	3	3
		log H									
	% removal	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
log $K_{ow}$	0	87	87	87	87	87	88	91	95	96	97
	1	87	87	87	87	87	88	91	95	96	97
	2	87	87	87	87	88	88	91	95	96	97
	3	88	88	88	88	88	89	92	95	97	97
	4	92	92	92	92	92	92	94	96	97	97
	5	93	93	93	93	93	93	94	96	96	97
	6	92	92	92	92	92	92	93	93	93	94

Tab. 4: Ergebnisse des Kläranlagenmodells SimpleTreat 3.0 [Struijs, 1996] in Abhängigkeit von  $\log K_{ow}$  und  $\log H$  der modellierten Substanz für eine Geschwindigkeitskonstante von  $1 \text{ h}^{-1}$  (= Substanz ist biologisch abbaubar).

## 5.2 Auswertung von Testergebnissen zur Bioabbaubarkeit eines Stoffes aus der Fachliteratur

Für eine korrekte Kläranlagenmodellierung nach den TGDs ist es notwendig, dass die Bioabbaubarkeitsdaten (ready biodegradability testing, inherent biodegradability testing) über exakt festgelegte Testverfahren bestimmt wurden, wie sie z.B. in OECD, 1997 beschrieben sind. Die Ergebnisse dieser kostenintensiven ökotoxikologischen Testverfahren sind allerdings nicht per se der Öffentlichkeit zugänglich. Während beispielsweise MITI-I-Testergebnisse (=Test auf ready biodegradability) zur Bioabbaubarkeit von Altstoffen in einem größeren Umfang frei abrufbar sind (z.B. unter [http://www.cerij.or.jp/ceri\\_en/index\\_e.shtml](http://www.cerij.or.jp/ceri_en/index_e.shtml)), sind entsprechende Angaben über Pflanzenbehandlungs- und Schädlingsbekämpfungsmittel (PBSM) aus Datenschutzgründen nicht verfügbar. In der Fachliteratur findet sich zwar eine Fülle von Angaben über das Bioabbauverhalten auch von PBSM, nur entsprechen die diesen Messungen zugrundeliegenden Verfahren i.d.R. nicht den oben genannten Testverfahren.

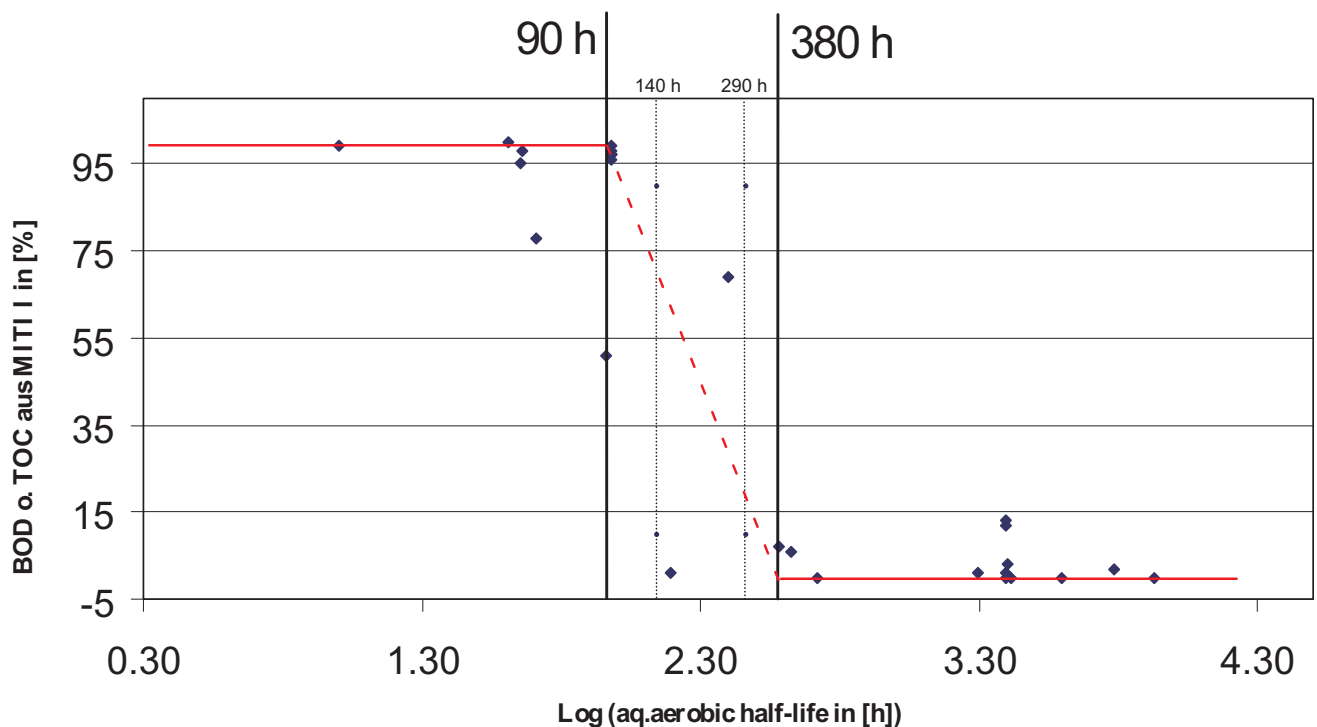


Abb.10: Auftragung von logarithmischen Halbwertszeiten für 28 Altstoffe (u.a. Aromaten, N-haltige, O-haltige, S-haltige Verbindungen) gegen den BOD- bzw. TOC-Wert aus einem MITI I Test. Die vertikalen Linien entsprechen theoretischen Halbwertszeiten von 90 bzw. 380 h und trennen Bereiche voneinander ab, die die Autoren zur Bewertung eines Literaturwertes vorschlagen.

Um trotzdem in solchen Fällen das oben beschriebene Verfahren zur Kläranlagenmodellierung benutzen und daraus Schätzwerte ableiten zu können, haben die Autoren per Los eine Gruppe von 28 Altstoffen unterschiedlichster Zusammensetzung ausgewählt und Literaturwerte für das Bioabbauverhalten dieser Verbindungen („aqueous aerobic biodegradation half-life“ Messswerte) mit MITI I-Testergebnissen für diese Stoffe verglichen. Die Altstoffe sind im Einzelnen: Methylmethacrylat, Dimethylamin, Phenol, Benzoesäure, Phenanthren, Diethanolamin, Butylbenzylphthalat, Dimethylphthalat, Monochloressigsäure, Akrylsäure, Catechol, Methylisobutylketon, Propionaldehyd, Quinolin, Benzol, Thioharnstoff, Diphenylamin, Diphenylnitrosamin, Pentachlorphenol, 1-Naphthylamin, 3,3'-Dichlorbenzidin, N,N'-Dimethylanilin, tert. Butylalkohol, Nitrobenzol, Chlorbenzol, 2,4-Dinitrophenol, Anthracen, 2,4,5-Trichlorphenol. Abb. 10 zeigt die Auftragung der logarithmischen Halbwertszeiten aus der Fachliteratur, gegen den BOD- bzw. TOC-Wert aus dem zugehörigen MITI-I Test derselben Substanz.

Die besten Übereinstimmungen zeigen sich für die Bereiche  $\leq 90$  h und  $\geq 380$  h. In diesen Abschnitten sprechen sowohl die Literaturwerte als auch die MITI I-Testergebnisse von einem eindeutig positiven als auch eindeutig negativen Bioabbaubarkeitsverhalten der Substanz. Für den Zwischenbereich ist eine derartige Zuordnung nicht möglich und der Vergleich liefert widersprüchliche Ergebnisse. Für eine probabilistische Kläranlagenmodellierung wird daher empfohlen bei Literaturwerten für die „aqueous aerobic biodegradation half-life“ von  $\leq 90$  h die Geschwindigkeitskonstanten  $1,0 - 0,3 \text{ h}^{-1}$ , bei Werten zwischen 90 und 380 h die Geschwindigkeitskonstanten  $0,3 - 0,1 \text{ h}^{-1}$  und bei Werten  $\geq 380$  h Geschwindigkeitskonstanten von  $0,1 - 0 \text{ h}^{-1}$  als die Grenzbereiche anzusehen, innerhalb denen das „wahre“ Abbauverhalten der Substanz in einer Kläranlage anzusiedeln sein wird.

### 5.3 Detaillierte Beschreibung der im Kläranlagenmodell enthaltenen Parameter

	A	B	C	D	E	F	G
89	Konz. Der UC in ausgebracht. Klärschlamm	Ces	[mol/kg]	6.40E-06			6.40E-06
90	Klärschlammausbringung	Gs	[kg/h]	7.58E+03			7.58E+03
91	UC-Belastungsfluß des eintret. Abwassers	Bf	[mol/h]		2.35E+01		2.35E+01
92	UC-Ant. d. bei Klärung in den Klärschlamm gelangt	xK	[-]	0.01			1.00E-02
93	UC-Ant. d. sich bei Klärung in Luft verflücht.	V	[-]	6.13E-01			6.13E-01
94	UC-Ant. d. u. behand. Abw. i. Wasser k. gelangt	xBw	[-]	1.70E-01			1.70E-01
95	ind. UC-Emission (Klärschl.) in Ackerboden	Ek4	[mol/h]		4.85E-02		4.85E-02
96	Kläranlagen-UC-Emission in Luft	Ek1	[mol/h]		1.44E+01		1.44E+01
97	ind. UC-Emiss. ins Wasser du. behand. Abw.	Ek2	[mol/h]		4.00E+00		4.00E+00
98	Konz. der UC in behandeltem Abwasser	Ce2a	[mol/m <sup>3</sup> ]				0.00E+00

Abb. 11: Abschnitt des Eingabefeldes für die biologische Kläranlage in REMODE.



**Konzentration der Umweltchemikalie in ausgebrachtem Klärschlamm (Ces)**  
[mol/kg]

Dieser Wert wird in mol pro kg Trockenmasse angegeben und wird für die Berechnung der indirekten UC-Emission über Klärschlamm in den Ackerboden  $E_{k4}$  benötigt.

**Klärschlammausbringung (Gs)** [kg/h]

Dieser Wert in der Einheit kg Trockensubstanz pro Stunde wird für die Berechnung der indirekten UC-Emission über Klärschlamm in den Ackerboden  $E_{k4}$  benötigt. Bei dem im Modell benutzten Wert von 7584,36 kg TS/h<sup>10</sup> handelt es sich um die in Baden-Württemberg im Jahr 1998 auf landwirtschaftliche Nutzflächen aufgebrauchte Menge an Klärschlamm [SLA, 2000].

**UC-Belastungsfluss des eintretenden Abwassers (Bf)** [mol/h]

Definiert wird damit das in die Kläranlage eintretende Abwasser. Bf kann berechnet werden, wenn einer der Werte  $E_{k1}$ ,  $E_{k2}$  oder  $E_{k4}$  bekannt ist. Liegt beispielsweise der Wert  $E_{k4}$  vor so ergibt sich Bf nach

$$Bf = \frac{Ek4}{P \times K}$$

wobei P dem Anteil des Klärschlammes der auf landwirtschaftliche Flächen aufgebracht wird entspricht. Dabei wurden für P die Daten für Baden-Württemberg von 1998 verwendet: Das Klärschlammaufkommen betrug 1998 insgesamt 322224 t TS wovon 66439 t TS auf landwirtschaftliche Flächen aufgebracht wurden [SLA, 2000]. Für P ergibt sich somit ein Wert von 66439 t TS / 322224 t TS gleich 0,206.

K entspricht dem Anteil der UC, welcher in den Klärschlamm gelangt. Im Modell muss der Wert für K für jede UC neu eingegeben werden. Der Wert lässt sich aus den Tabellen 1 bis 4 ablesen (% to sludge). In die Formel eingesetzt wird jedoch nicht der abgelesenen prozentuale Anteil sondern der mengenmäßige Anteil, z.B. bei einem prozentualen Anteil von 1% beträgt dieser 1/100 gleich 0,01.

**UC-Anteil der sich bei Klärung in Luft verflüchtigt (V)** [dim.los]

Eingegeben wird hier der mengenmäßige Anteil. Der prozentuale Anteil lässt sich aus den Tabellen 1 bis 4 ablesen ("% to air"). Für einen abgelesenen prozentualen

---

<sup>10</sup> Die Abkürzung TS steht für "Trockensubstanz".

Anteil von beispielsweise 10% ist hier der mengenmäßige Anteil von 10/100 gleich 0,1 einzusetzen.

**UC-Anteil der über behandeltes Abwasser ins Wasser gelangt (xBw) [dim.los]**

Eingegeben wird hier der mengenmäßige Anteil. Der prozentuale Anteil lässt sich aus den Tabellen 1 bis 4 ablesen ("% to water"). Für einen abgelesenen prozentualen Anteil von beispielsweise 10% ist hier der mengenmäßige Anteil von 10/100 gleich 0,1 einzusetzen.

**Indirekte UC-Emission (Klärschlamm) in Ackerboden (Ek4) [mol/h]**

Dieser Wert bezeichnet die indirekte Emission der UC in das Ackerbodenkompartiment, welche über ausgebrachten Klärschlamm erfolgt. Der Wert wird im Modell nach

$$Ek4 = Ces \times Gs$$

ermittelt.

**Kläranlagen-UC-Emission in Luft (Ek1) [mol/h]**

Dieser Wert beschreibt die indirekte Emission der UC in das Luftkompartiment, die während des Klärprozesses erfolgt. Der Wert wird im Modell nach

$$Ek1 = Bf \times V$$

ermittelt.

**Indirekte UC-Emission ins Wasser durch behandeltes Abwasser (Ek2) [mol/h]**

Dieser Wert bezeichnet die indirekte Emission der UC in das Wasserkompartiment, die über das aus der Kläranlage abfließende Abwasser erfolgt. Der Wert wird im Modell nach:

$$Ek2 = Bf \times xBw$$

ermittelt.

**Konzentration der UC in behandeltem Abwasser (Ce2a) [mol/m<sup>3</sup>]**

Falls ein Literaturwert für die UC-Konzentration in behandeltem Abwasser (das aus der Kläranlage in den Vorfluter und damit in das Hauptkompartiment Wasser fließt) vorliegt, wird dieser mit dem Zufluss aus Kläranlagen Gk multipliziert, was zu einem genaueren Wert für die indirekte UC-Emission in das Wasserkompartiment führt, als die Abschätzung über das Kläranlagenmodell.

Deshalb wird bei Vorliegen einer Eingabe in Zelle D 98 die Zelle G 97 automatisch auf Null gesetzt. Formal bedeutet das, dass in REMODE bei dieser Datenlage die indirekte Emission ins Wasser durch behandeltes Abwasser als Beitrag zum Hintergrundeintrag ins Wasserkompartiment (Beitrag zu Zelle I 163) gerechnet wird.

## 6 Anhang

### 6.1 Tipps zum Modellieren von Emissionsszenarien in REMODE

Die Parameter für die direkte Emission  $E_1$  bis  $E_5$ , die Hintergrundeinträge  $B_1$  bzw.  $B_2$  und die Kläranlage ( $E_{k1}$ ,  $E_{k2}$ ,  $E_{k4}$ ) definieren in REMODE das Emissionsszenario. Je nach Wahl der Eingabewerte für diese Parameter kann der Anwender eine Vielzahl unterschiedlichster Emissionsszenarien durchspielen. Wird zudem eine Sensitivitätsanalyse dieser Parameter vorgenommen, können speziell diejenigen Parameter identifiziert werden, die wesentlich die Gehalte in den Umweltmedien bestimmen. Dies kann besonders hilfreich sein bei der Suche nach Vermeidungs- und Reduktionsstrategien.

Für den Anwender gilt es zu beachten, dass nicht jeder dieser Parameter eindeutig einem einzigen definierten Prozess bzw. Vorgang zuzuordnen ist. Eine direkte Emission in das Hauptkompartiment Wasser z.B. kann sowohl durch einen Emittenten, der mit UC verunreinigtes Wasser in einen Fluss entlässt, als auch durch Abdrift bei Ausbringung einer UC auf Ackerboden, verursacht sein. In REMODE wären beide Szenarien identisch.

Prinzipiell sind für das Modellieren von Emissionsszenarien in REMODE drei Vorgehensweisen zu unterscheiden, die sich größtenteils aus der jeweils vorliegenden Datenlage ergeben:

1. Es liegen Angaben über die Emission vor (Aufwandmengen, Verkaufszahlen usw.), dagegen keine Messwerte der UC in der Umwelt. In diesem Fall kann über eine Modellierung geschätzt werden, was für Konzentrationen für die Umweltmedien daraus zu erwarten sind<sup>11</sup>.
2. Es liegen Messwerte für die Konzentration der UC in den verschiedenen Umweltmedien vor, aber keine Angaben über die diesen zugrunde liegenden Emissionen. Die Modellierung kann in diesem Fall helfen diese Aufwandmengen abzuschätzen.

---

<sup>11</sup> Dieses Vorgehen entspricht der Anwendung dieser Modelle innerhalb der EU-Risikobewertung.

3. Sowohl Angaben über die Emissionen, als auch Messwerte der UC in der Umwelt liegen vor. In diesem Fall hilft die Modellierung zu beurteilen ob die Angaben zur Emission vollständig sind.

## 7 Literaturverzeichnis

**[Atkins, 1988]**

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

**[BLW, 1992]**

Bayerisches Landesamt für Wasserwirtschaft (1992). *Deutsches Gewässerkundliches Jahrbuch*, Donaugebiet, Abflussjahr 1989. München.

**[BLW, 1992a]**

Bayerisches Landesamt für Wasserwirtschaft (1992). *Deutsches Gewässerkundliches Jahrbuch*, Rheingebiet, Teil II: Main; Abflussjahr 1989. München.

**[Brandes et al., 1996]**

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.

**[Britannica, 2000]**

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

**[Brüggemann, 1986]**

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

**[Chiao et al., 1994]**

Chiao, F. F., Currie, R.C., McKone, T.E. (1994). *DRAFT FINAL REPORT; Intermedia Transfer Factors for Contaminants Found at Hazardous Waste Sites, BENZENE*. Risk Science Program (RSP)  
Department of Environmental Toxicology, University of California, Davis, California 95616.

**[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.

**[Kuchling, 1989]**

Kuchling, Horst (1989) Taschenbuch der Physik, 12. Auflage, Thun, Frankfurt/Main

**[LfU, 1979]**

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

**[LfU, 1992]**

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

**[LfU, 1994]**

Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg LfU (1994). *Deutsches Gewässerkundliches Jahrbuch - Rheingebiet, Teil I, Hoch- und Oberrhein 1991 (1.11.1990-31.12.1991)*. Karlsruhe.

**[LfU, 1997]**

Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg LfU (1997). *Umweltdaten 95/96*. Karlsruhe.

**[Lehn, 1996]**

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

**[Lyman et al., 1982]**

Lyman, W.J., Reehl, W.F., Rosenblatt, D.H. (1982). *Handbook of chemical property estimation methods*. McGraw-Hill Book Company.

**[Märker et al., 2000]**

Märker, B., Urhahn, T., Ballschmiter, K. (2000). *Regionale Verteilungsmodelle für Chemikalien im Vergleich*. Arbeitsbericht der Akademie für Technikfolgenabschätzung, Nr. 172 / November 2000.

**[Mackay, 1991]**

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

**[Mackay und Paterson, 1981]**

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

**[Mackay und Paterson, 1986]**

Mackay, D., und Paterson, S. (1986). Model Describing the Rates of Transfer Processes of Organic Chemicals between Atmosphere and water. *Environ. Sci. Technol.*, Vol. 20, No. 8.

**[Mackay et al., 1985]**

Mackay, D., Paterson, P., Cheung, B., Neely, W.B. (1985). Evaluating the environmental behavior of chemicals with a level III fugacity model. *Chemosphere*, Vol. 14, No. 3/4, S. 335-374.

**[Mackay et al., 1986]**

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

**[Mackay und Paterson, 1991]**

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 et al., 1992]**

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 et al., 1992a]**

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

**[OECD, 1997]**

Classification, packaging and labeling of dangerous substances in the European Union. Part 2 - Testing methods. Luxembourg: Office for Official Publications of the European Communities, 1997.



**[Paterson und Mackay, 1985]**

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

**[Shiu und Mackay, 1986]**

Shiu, W.Y. und Mackay, D. (1986). A Critical Review of Aqueous Solubilities, Vapor Pressures, Henry's Law Constants, and Octanol-Water partition Coefficients of the Polychlorinated Biphenyls. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, Vol. 15, No. 2. S. 911-929.

**[SBA, 1997]**

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

**[SBA, 1999]**

Statistisches Bundesamt, Wiesbaden (1999). *Statistisches Jahrbuch 1999 für die Bundesrepublik Deutschland*. Metzler-Poeschel Verlag, Stuttgart.

**[SLA, 1994]**

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

**[SLA, 1999]**

Statistisches Landesamt Baden-Württemberg (1999). *Statistisches Taschenbuch 1999*. Stuttgart.

**[Struijs, 1996]**

Struijs, J. (1996). *Simple Treat 3.0: a model to predict the distribution and elimination of chemicals by sewage treatment plants*; RIVM report No. 719101025.

**[Uni Hohenheim]**

Persönliche Mitteilung von Fr. Dr. A. Merkle, Universität Hohenheim.

## **Veröffentlichungen der TA-Akademie zum Thema**

### **Umwelt und Umweltchemie**

Elstner, E. F.: Ozon in der Troposphäre - Bildung, Eigenschaften, Wirkungen. Stuttgart, 1996. (Gutachten der Akademie für Technikfolgenabschätzung). ISBN 3-930241-50-1.

Flaig, H.; Mohr, H.: Der überlastete Stickstoffkreislauf: Strategien einer Korrektur. Leipzig; Heidelberg, 1996 (Barth). (Nova Acta Leopoldina; Neue Folge, Nr. 289: Bd. 70). ISBN 3-335-00498-1.

Kaiser, G.; Wiedmann, T.; Ballschmiter, K.: Organische Spuren als Emissionen aus Verbrennungsanlagen und deren humantoxikologische und ökotoxikologische Einordnung. Teil 1: Organische Emissionen. Stuttgart, 1998. (Arbeitsbericht Nr. 101 der Akademie für Technikfolgenabschätzung). ISBN 3-932013-26-3. (Eine Zusammenfassung ist im Internet abrufbar)

Kaiser, G.; Wiedmann, T.; Ballschmiter, K.: Organische Spurenstoffe als Emissionen aus Verbrennungsanlagen und deren humantoxikologische und ökotoxikologische Einordnung. Teil 2: Humantoxikologische und ökotoxikologische Einordnung. Stuttgart, 1998. (Arbeitsbericht Nr. 102 der Akademie für Technikfolgenabschätzung). ISBN 3-932013-27-1. (Eine Zusammenfassung ist im Internet abrufbar)

Knorr, C.; Martens, B.: Analyse von Tagungen zur Umweltbiologie. Expertenkommunikation, Akteure und wissenschaftlich-technische Entwicklungstrends. Stuttgart, 1994. (Arbeitsbericht Nr. 42 der Akademie für Technikfolgenabschätzung). ISBN 3-930241-43-9.

Knorr, C.; Schell, T. von (Hrsg.): Mikrobieller Schadstoffabbau - ein interdisziplinärer Ansatz. Wiesbaden, 1997 (Vieweg-Verlag). ISBN 3-528-06596-6.

Kochte-Clemens, B., Ballschmiter, K.: Umweltpläne im Vergleich. Schwerpunkt: Emissionen / Immissionen. Stuttgart, 2000. (Arbeitsbericht Nr. 163 der Akademie für Technikfolgenabschätzung). ISBN 3-934629-08-3). Im Internet abrufbar. (Im Internet abrufbar)

\*Kochte-Clemens, B.: Umweltpläne im Vergleich. Schwerpunkt: Emissionen und Immissionen. Stuttgart, 2000 (Kurzinformativ der Akademie für Technikfolgenabschätzung). (Im Internet abrufbar)

Kuch, H., Ballschmiter, K.: Hormonell wirksame Verbindungen in der Umwelt Baden-Württembergs. Stuttgart November 1999. (Arbeitsbericht Nr. 151 der Akademie für Technikfolgenabschätzung). ISBN 3-932013-93-X. (Im Internet abrufbar)

Märker, B.; Urhahn, T.; Ballschmiter, K.: Regionale Verteilungsmodelle für Chemikalien im Vergleich. Stuttgart, 2000 (Arbeitsbericht Nr. 172 der Akademie für Technikfolgenabschätzung). ISBN 3-934629-18-0. (Im Internet abrufbar)

Schwab, U.; Schlaf, S.; Flaig, H.: Vegetationsveränderungen im Zusammenhang mit atmosphärischen Stickstoffeinträgen. Stuttgart, 1996. (Arbeitsbericht Nr. 57 der Akademie für Technikfolgenabschätzung). ISBN 3-930241-65-X.

\*Wiedmann, Th.; Kersten, J.; Ballschmiter, K.-H.: Art und Menge von stofflichen Emissionen aus dem Verkehrsbereich. Literaturstudie. Stuttgart, 2000. (Arbeitsbericht Nr. 146 der Akademie für Technikfolgenabschätzung). ISBN 3-932013-84-0. (Im Internet abrufbar)

Wiedmann, Th.: Art und Menge von Verkehrsemissionen. Stuttgart, 2001 (Kurzinformativ der Akademie für Technikfolgenabschätzung). (Im Internet abrufbar)

\* = vergriffen

Arbeitsberichte, Diskursberichte, Bürgergutachten, Ergebnisse, Leitfäden, Präsentationen, Materialien und Analysen	DM 15,--	Euro 7,70
Gutachten	DM 20,--	Euro 10,25
TA-Dokumentation (inkl. CD-ROM)	DM 30,--	Euro 15,35
Empfehlungen	DM 10,--	Euro 5,15
CD-ROM	DM 15,--	Euro 7,70
Ensys	DM 27,--	Euro 13,85
Grünes Gold, Kurzinfos <i>Zzgl. Porto und Verpackung</i>	kostenfrei	