

Modellering van organische microverontreinigingen in oppervlaktewater, sediment en aquatische organismen

Inleiding

Waarom modellering van toxische stoffen?

Zowel in het milieubeleid als in het waterbeheer is er een toenemende behoefte aan een integrale beschrijving van het gedrag van stoffen in het milieu. De interesses zijn echter niet geheel identiek. Voor het stoffenbeleid zal in de eerste plaats de vraag gesteld worden waar een nieuwe stof uiteindelijk terecht zal komen en in welke hoeveelheden, en wat de globale of nationale gevolgen zullen zijn van bijstelling van het beleid voor bestaande



DR. W. A. BRUGGEMAN
(DBW/RIZA)



IR. D. J. DE VRIES
(WL)



DRS. M. B. DE VRIES
(WL)

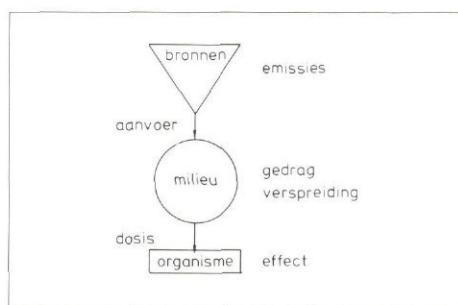
probleemstoffen. Vanuit het waterbeheer wordt vooral meer inzicht verlangd in de toekomstige ontwikkelingen voor een bestaande verontreinigingsinstallatie en de invloed daarop van mogelijke beheersmaatregelen. De nadruk ligt bij het laatste meer op een betrouwbare voorspelling van variaties in ruimte en tijd dan op een indicatieve risico-evaluatie. In beide gevallen gaat het om inzicht in de biologische effecten van verontreinigingen in relatie tot de belasting van het milieu met deze stoffen. Voorspelling van toekomstige ontwikkelingen vereist ont-rafeling van de gehele oorzaak-gevolg keten; van de bronnen (emissies van stoffen) tot de biologische effecten op individuele organismen, op de mens, of op het functioneren van de ecosystemen (zie afb. 1).

In de praktijk is de oorzaak-gevolg keten eerder een netwerk. Van één stof kunnen meerdere bronnen bestaan, effecten kunnen op verschillende plaatsen en bij verschillende organismen gelijktijdig optreden en veroorzaakt worden door combinaties van factoren. Het is daardoor niet altijd eenvoudig om aan te geven wat de meest effectieve beheersmaatregelen zijn in een probleemsituatie.

Samenvatting

Het is op dit moment in principe mogelijk om het gedrag van persistente organische micro-verontreinigingen in oppervlaktewater te beschrijven en toekomstige gehalten in waterbodems en organismen te voorspellen met behulp van wiskundige modellen. Voorwaarde daarvoor is dat voldoende gegevens beschikbaar zijn met betrekking tot de fysisch-chemische eigenschappen van de stoffen, de belasting op het watersysteem, slibtransport en voedselketenrelaties. Dat is in het kort de uitkomst van een haalbaarheidsstudie, uitgevoerd door het Waterloopkundig Laboratorium (WL) en Rijkswaterstaat. Het onderwerp van deze studie was de verspreiding van hexachloorbenzeen (HCB) en polychloorbiphenylen (PCB's) in het Ketelmeer en het IJsselmeer, vanaf de aanvoer via de IJssel tot en met de opslag in de waterbodem en de bio-accumulatie in aal. Daarvoor zijn twee dynamische modellen ontwikkeld, genaamd IMPAQT en UPTAQE, waarmee respectievelijk de fysisch-chemische verspreiding in oppervlaktewater en sediment, en de accumulatie in aquatische biota gesimuleerd kunnen worden.

Een gevoeligheidsanalyse geeft aan welke processen en invoergegevens het meest kritisch zijn voor het eindresultaat van de simulatie, en waar aanvulling van proceskennis of meetgegevens noodzakelijk is. Op deze wijze dragen de geïntegreerde modellen bij aan de sturing van het onderzoek. De modellen vinden ondertussen reeds toepassing in diverse gebiedsgerichte studies, speciaal waar het gaat om ontwikkelingen in de kwaliteit van de waterbodem, en in het project stofstromen, onderdeel van de landelijke systeemanalyse voor de waterhuishouding.



Afb. 1 - Oorzaak-gevolg keten voor milieu-verontreiniging met toxische stoffen. Dosis-effect relaties zijn hiervan een onderdeel.

De rol van milieuchemische modellering is de beschrijving van het verband tussen de aanvoer van een stof en de uiteindelijke blootstelling, de dosis voor relevante organismen, die eventueel kan leiden tot een toxicologisch effect. Speciaal bij min of meer persistente (slecht afbreekbare) stoffen die zich ophopen in sedimenten en organismen worden hoge eisen gesteld aan deze beschrijving, daar effecten dan zeer vertraagd en ver verwijderd in het lozingspunt tot uiting kunnen komen. Een simpele 'black-box' benadering voldoet niet meer wanneer inzicht gewenst is in de tijdschaal van de veranderingsprocessen na sanering van de lozingen en in de mogelijkheden om deze processen te versnellen door beheersmaatregelen als het afdekken of baggeren van verontreinigd bodemmateriaal. We zijn dan aangewezen op een realistische beschrijving van de factoren die het lot

van een stof in het (aquatisch) milieu kunnen beïnvloeden.

Milieuchemische processen

Om tot een integrale beschrijving te komen is kwantificering nodig van de belangrijkste processen. Hierin zijn drie hoofdcategorieën te onderscheiden:

Advectief transport

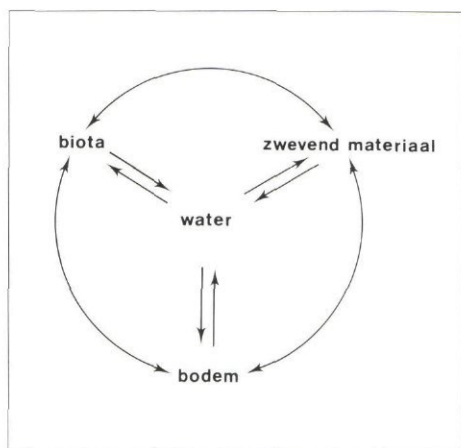
Stroming van water en lucht, bezinking en opwerveling van verontreinigd bodemmateriaal zijn verantwoordelijk voor de grote verplaatsingen van de verontreinigingen.

Verdelingsprocessen

Uitwisseling tussen verschillende fasen, veelal door moleculaire diffusie, bepaalt het voorkomen in diverse milieu-componenten (poriewater, oppervlaktewater, slib, organismen, atmosfeer). Verdelingsevenwichten worden gekarakteriseerd door partitiecoëfficiënten.

Afbraakprocessen

Vele stoffen kunnen verdwijnen door biologische of (foto)chemische omzetting in andere stoffen, die overigens niet altijd onschuldig van aard zijn. Van volledige afbraak is pas sprake als uitsluitend minerale bestanddelen (water, koolzuurgas, chloride) en methaan overblijven. De mate en snelheid van afbraak (de afbreekbaarheid) verschilt sterk per stof. Van sommige stoffen is tengevolge van hydrolyse binnen enkele uren bijna niets



Afb. 2 - Schematisering van uitwisselingsprocessen voor microverontreinigingen binnen het aquatisch milieu. De dubbele pijlen duiden evenwichts(partitie)-processen aan.

meer terug te vinden in water, terwijl van andere verbindingen (sommige gechloroerde aromatische koolwaterstoffen, waaronder enkele PCB's) geen omzetting onder natuurlijke omstandigheden is waargenomen. Ergens tussen deze twee uitersten bevinden zich de meeste organische microverontreinigingen. Een aparte groep vormen de zware metalen, die weliswaar niet afgebroken worden, maar wel kunnen voorkomen in verschillende chemisch te onderscheiden vormen met zeer uiteenlopende milieu-eigenschappen, een verschijnsel dat 'speciatie' wordt genoemd. Het zal duidelijk zijn dat vooral min of meer persistente stoffen (voor zover deze toxisch zijn) op lange termijn milieu-problemen kunnen veroorzaken.

Bepalend voor de plaats in het milieu (het milieucompartiment) waar verschillende stoffen terecht zullen komen, zijn in eerste instantie de milieuchemische verdelingsprocessen. Vluchtige verbindingen die niet al te goed in water oplosbaar zijn, zoals benzeen en chloroform, verdwijnen door verdamping snel uit het aquatische milieu en worden door atmosferisch transport verdund en over grote afstanden verspreid. Verschillende routes van uitwisseling tussen diverse aquatische ecosysteemcomponenten zijn weergegeven in afb. 2. Zowel zware metalen als hydrofobe organische stoffen hebben de neiging zich door adsorptie te binden aan zwevende deeltjes. In sedimentatiegebieden kan dit bij langdurige belasting een bezwaarlijk verontreinigde waterbodem opleveren. Omgekeerd is in principe ook nalevering van verontreinigingen mogelijk in een situatie waarin emissies op het oppervlaktewater al sterk verminderd zijn, door opwerveling van bodemmateriaal en desorptie, of via

diffusief transport vanuit het poriënwater.

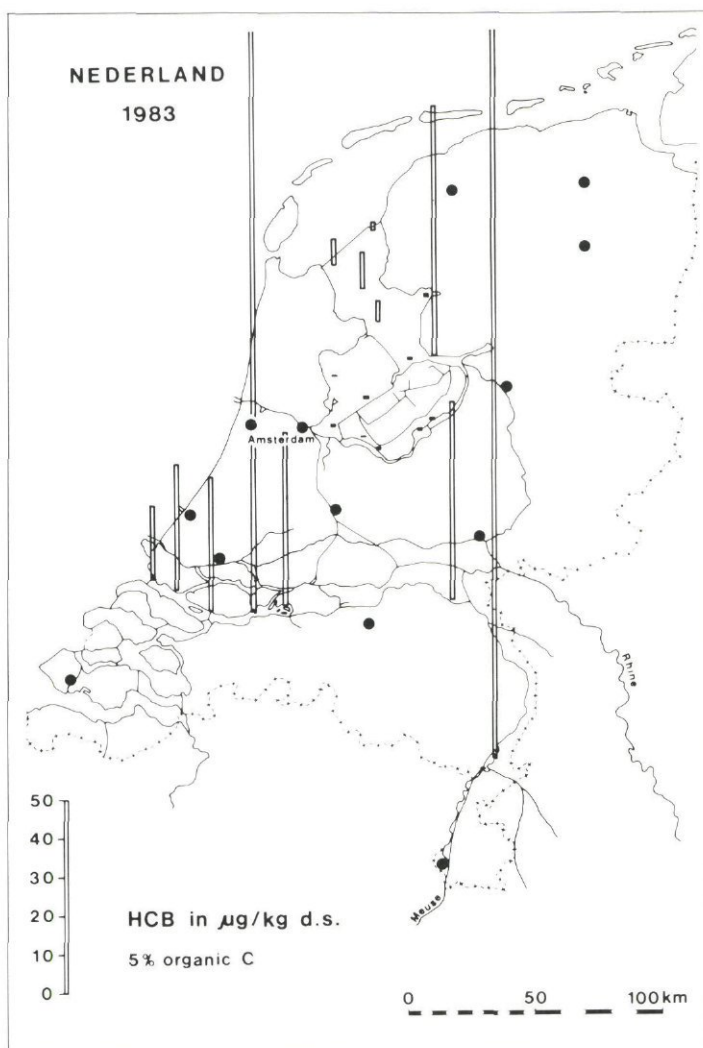
Veel van de stoffen die zich ophopen in sedimenten zijn ook onderhevig aan bio-accumulatie in waterdieren. Bij organische verbindingen bepaalt de hydrofobiteit van de stof voor een groot deel de mate waarin deze zich zal concentreren in dierlijk vetweefsel. De opnameroutes kunnen echter per stof en per organisme verschillend zijn. Bekend is dat directe uitwisseling van opgeloste stoffen tussen water en organismen meestal een essentieel proces is (Bruggeman, 1983). Voor de sterkst accumulerende stoffen kan echter ook het voedsel een belangrijke bijdrage leveren, afhankelijk van bijvoorbeeld het aandeel van benthische organismen en detritus uit verontreinigde waterbodems in het voedselpakket, of de positie van een predator in de voedselketen.

Een integrale beschrijving van het verband tussen bronnen van verontreini-

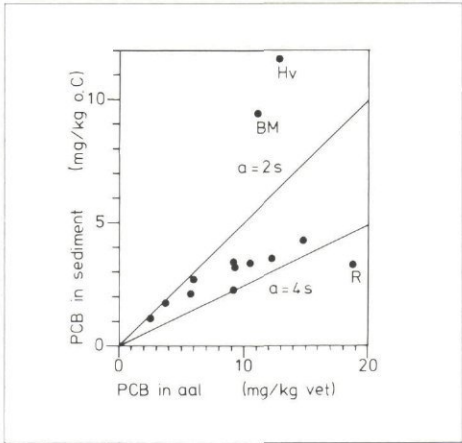
gingen en mogelijke effecten met het oog op toekomstige ontwikkelingen vraagt een gedegen inzicht in de paden en lotgevallen van stoffen. Vereist is herkenning en kwantificering van de belangrijkste aanvoerroutes en milieuchemische processen inclusief bio-accumulatiemogelijkheden te beschikken om deze processen kwantitatief aan elkaar te koppelen: we hebben het dan over een gecombineerde mathematische modellering van hydraulische, milieuchemische en biologische processen. Deze modellering van microverontreinigingen is onderwerp van een samenwerkingsproject tussen de Rijkswaterstaat en het Waterloopkundig Laboratorium (WL).

Waterbeheer

Deze studie spitst zich toe op de verspreiding van een aantal persistente organische microverontreinigingen in sedimentatiegebieden van de Nederlandse grote rivieren. Van het begin af aan is aangestuurd op een model waarin niet alleen



Afb. 3 - Hexachloorbenzeen in waterbodems. De staafhoogte geeft het HCB-gehalte ter plaatse weer (genormaliseerd naar een standaardbodem met 5% organisch koolstof).



Afb. 4 - Relatie tussen PCB-gehalten in waterbodem en rode aal in Nederlandse oppervlaktewaters Uitschieters: HV = Haringvliet, BM = Beneden Merwede, R = Roer (Bron: werkgroep PCB's in het Nederlands aquatisch milieu, interim-verslag, mei 1984, RIZA, RIVO, RIVM, DGMH).

de kwaliteit van het oppervlaktewater, maar ook van waterbodem en organismen beschreven wordt. Belangrijke aan- knopingspunten zijn de hoge gehalten van diverse organochloorverbindingen, o.a. polychloorbiphenylen (PCB's) en hexachloorbenzeen (HCB), in aal in de grote rivieren, gemeten door het Rijks- instituut voor Visserij-onderzoek sinds 1977 (Kerkhoff e.a., 1986a/b), en de geconstateerde verhogingen van dezelfde stoffen in het sediment van gebieden die direct door de Rijn en de Maas beïnvloed worden (zie afb. 3). De gehalten in deze twee compartimenten, bodem en organismen, vertonen een duidelijk verband (zie afb. 4), dat voor een deel theoretisch te onderbouwen is, uitgaande van bestaande kennis betreffende adsorptie- en bio-accumulatie-even- wichten (Bruggeman e.a., 1985). Even duidelijk is echter dat bij verandering van de belastingssituatie een verstoring van het evenwicht zal optreden, waardoor toekomstige ontwikkelingen en reacties op beheersmaatregelen moeilijk voorspelbaar zijn. Vanwege de grote

hoeveelheden stoffen die in de bodem zijn opgeslagen is het vooral de vraag hoe snel watersystemen (en vooral de kritische organismen daarin) zich zullen aanpassen aan de verbeterde situatie. In de model- lering diende daarom in het bijzonder aandacht te worden besteed aan de beschrijving van niet alleen de even- wichtsniveaus, maar ook van de kinetiek van de diverse processen, om reactietijden zo goed mogelijk in beeld te brengen.

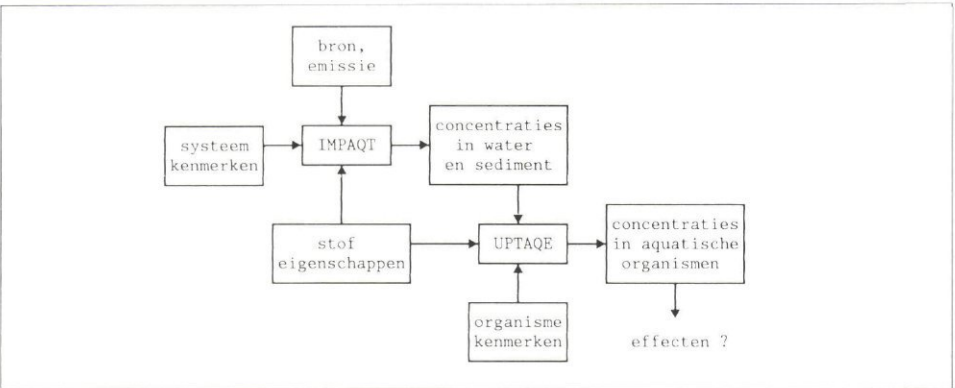
Haalbaarheidsstudie

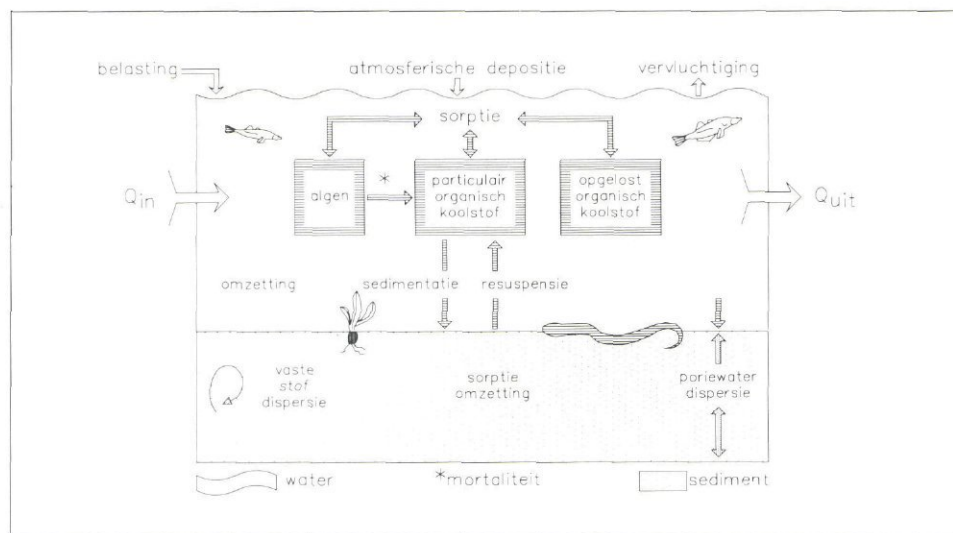
Ook het experimenteel onderzoek naar milieuchemische processen bij DBW/ RIZA is de laatste twee jaar juist gericht op bepaling van de snelheden van omzettingen en uitwisselingsprocessen. De modelstudie gaat hiermee hand in hand: van het experimenteel proces- onderzoek worden zo goed mogelijke schattingen van procesparameters verwacht ten behoeve van de modellering, terwijl de modelstudie door middel van gevoeligheidsanalyse moet aangeven welke processen voor een gegeven stof het meest kritisch zijn, en welke nauw- keurigheid in de procesmetingen vereist is. De modelstudie dient eveneens goed aan te sluiten bij het onderzoek in de veld- situatie. Een model moet kunnen uitgaan van betrouwbare gegevens betreffende de uitgangssituatie en de aanvoer van verontreinigingen, waterdebieten, sedimentatie- en stromingspatronen en, ten behoeve van de bio-accumulatie- modellering, tevens van biologische processen, zoals voeding en groei van organismen. In deze TOW-studie is het IJsselmeer met daaraan gekoppeld het Ketelmeer als proefgebied gekozen. Van dit gebied zijn (relatief!) veel meet- gegevens beschikbaar van micro- verontreiniging in sedimenten, zwevend stof en organismen, met name afkomstig uit het Rijkswaterstaatsproject MIVEOS en uit door het RIVO uitgevoerd onder- zoek. Ketelmeer en IJsselmeer verschillen

onderling sterk in mate van beïnvloeding door Rijnslib (het Ketelmeer fungeert min of meer als voorbezinkbak), in hydraulische verblijftijd, bodemsamenstel- ling en fytoplanktondichtheid. Dit zijn stuk voor stuk factoren die gedrag en verspreiding van microverontreinigingen sterk kunnen beïnvloeden. Hoewel het- zelfde water beide deelgebieden door- stroomt worden inderdaad grote verschillen gevonden in de gehalten van microverontreinigingen, zowel in de bodem (afb. 3) als in organismen en zwevend materiaal. Het gekozen proef- gebied levert zo het noodzakelijke minimum aan invoer- en calibratie- gegevens voor de simulatie. Een bijzonder aspect in deze modelstudie in de tijd- schaal. Door de ophoping van veront- reinigingen in sediment is de verblijftijd van deze stoffen in de bodem vele malen groter dan de hydraulische verblijftijd. Voor slecht afbreekbare stoffen zouden waarneembare veranderingen van gehalten in de bovenste sedimentlagen zich slechts zeer langzaam kunnen vol- trekken, in de orde van jaren in plaats van dagen of weken. Als modelstoffen zijn in eerste instantie hexachloorbenzeen (HCB) en polychloor- biphenylen (PCB's) gekozen; persistente, gechloraarde aromatische koolwater- stoffen, die onder meer bekend zijn vanwege hun ophoping in waterdieren. Deze stoffen zijn chemisch zeer verwant, maar vertonen voldoende verschillen in eigenschappen om uiteenlopende verspreiding in het aquatisch milieu te verwachten. Van HCB is reeds een duidelijke daling in de aanvoer van de Rijn waargenomen, die na verloop van tijd zijn weerslag zal hebben op bodem- organismen en sedimenten beneden- strooms (zie afb. 8). Deze TOW-studie is een eerste aanzet tot de ontwikkeling van milieuchemische modellen die geschikt zijn voor onder- bouw van het milieubeleid en het beheer van watersystemen. De nadruk ligt in deze fase niet zozeer op een perfecte simulatie en calibratie van de modellen, als wel op het weergeven van voorspellingsmogelijkheden, kritische processen, onzekerheden en hiaten in het veld- en laboratoriumonderzoek.

De modellen IMPAQT en UPTAQE
Afb. 5 geeft schematisch weer langs welke weg met de modellen IMPAQT en UPTAQE wordt gesimuleerd hoe een emissie van een microverontreiniging resulteert in gehalten van die micro- verontreiniging in oppervlaktewater, waterbodem en aquatische organismen. Uitgaande van een emissie van een

Afb. 5 - Schematische weergave van het geïntegreerde model IMPAQT-UPTAQE.





Afb. 6 - Processen in het aquatisch systeem die zijn opgenomen in het model IMPAQT.

bepaalde stof in een systeem is men allereerst geïnteresseerd in de concentraties die in het systeem optreden, en de verandering daarvan in de tijd. Dit kan worden gesimuleerd met het model IMPAQT (zie afb. 6). Deze informatie is op zich al van belang om een beeld te krijgen van de verspreiding en om een vergelijking te kunnen maken met milieukwaliteitsdoelstellingen, maar kan bovendien worden gebruikt als invoer voor het model UPTAQE (zie afb. 12). Dat model kan dan de in een aquatisch organisme optredende concentraties simuleren.

De modellen zijn ontwikkeld door het Waterloopkundig Laboratorium (WL), in samenwerking met de Dienst Binnenwateren/RIZA en Dienst Getijdewateren van Rijkswaterstaat, en Manhattan College in New York (USA).

Het fysisch-chemisch verspreidingsmodel IMPAQT

De naam IMPAQT staat voor: 'Integral Modeling of the Pollution of Aquatic systems by Toxic compounds'. Het model is een specifieke versie van het algemene waterkwaliteitsmodel DELWAQ, dat werd ontwikkeld door ir. L. Postma van het Waterloopkundig Laboratorium. De doelstellingen bij IMPAQT kunnen als volgt worden samengevat:

- kennisvergroting
- terugkoppeling naar veld- en laboratoriumonderzoek
- voorspelling van toekomstige ontwikkelingen in sediment en water
- toelevering van concentraties aan het bio-accumulatiemodel.

De eerstgenoemde doelstelling hangt samen met de complexiteit van de problematiek; een wiskundig model is het

hulpmiddel bij uitstek om het inzicht in de problematiek te vergroten, en om het belang van verschillende aspecten aan het licht te brengen. De tweede doelstelling ligt in het verlengde hiervan. Bij het toepassen van een model wordt duidelijk welke hiaten er in de kennis van de problematiek bestaan, welke relevante gegevens ontbreken, en op welke wijze aspecten veld- en laboratoriumonderzoek zich dus zou moeten richten. Vanuit beleidsmatig oogpunt is de meest interessante eigenschap van een model dat men er voorspellingen mee kan doen. Men kan onder andere de gevolgen van verschillende scenario's met elkaar vergelijken (bijvoorbeeld: handhaving huidige emissie tegen sanering). Tenslotte is een van de doelstellingen van IMPAQT, dat het model concentraties moet kunnen leveren aan het bio-accumulatiemodel UPTAQE. Dat model kan in principe ook met gemeten concentraties worden gevoed, maar die zijn in het algemeen schaars, en geven bovendien zelden de benodigde verdeling in opgeloste en geadsorbeerde fracties.

Schematisering van het aquatisch systeem

Het model biedt de mogelijkheid een aquatisch systeem te verdelen in een aantal met elkaar verbonden segmenten. Zo ligt het voor de hand een rivier of een estuarium als een keten van segmenten te beschrijven. Men kan echter ook een meer complex stelsel van rivieren en meren (bijvoorbeeld het Benedenrivierengebied) naar eigen inzicht in segmenten opdelen. Binnen een segment wordt de waterkolom volledig gemengd verondersteld. Onder de waterkolom is het sediment in drie lagen verdeeld (zie afb. 7). Per segment worden dus vier

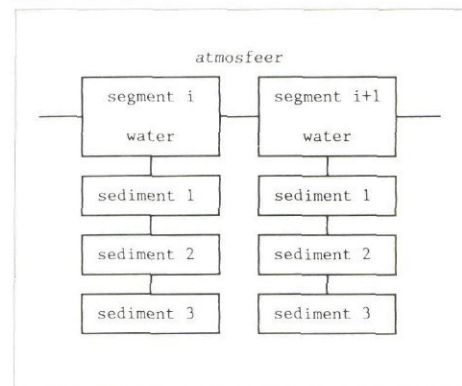
concentraties berekend: voor de waterkolom en drie sedimentlagen. In afb. 7 geven de verbindingslijnen aan waar uitwisseling plaatsvindt.

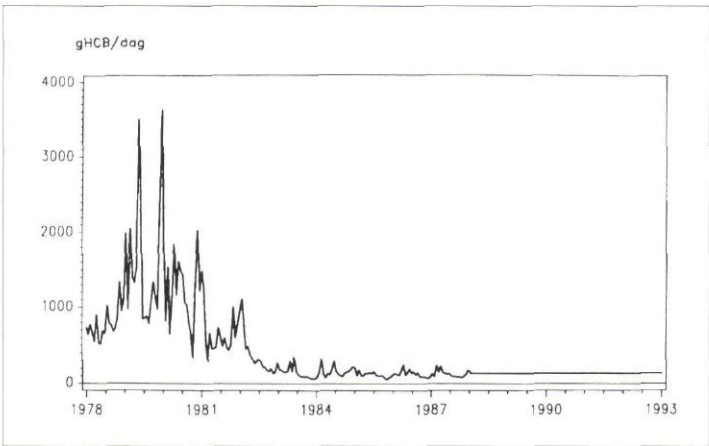
Naast ruimtelijke segmenten kunnen in een aquatisch systeem een aantal compartimenten (water, fytoplankton, sediment etc.) worden onderscheiden. Afb. 6 geeft de compartimentering zoals die in IMPAQT wordt gehanteerd. Het sediment bestaat uit (porie)water, particulier materiaal en opgelost materiaal. In de waterkolom worden diezelfde compartimenten onderscheiden, met daarbij nog fytoplankton.

De compartimenten die in het model als adsorbent voor de micro-verontreiniging fungeren – particulier materiaal, opgelost organisch materiaal en algen – worden alle uitgedrukt in eenheden van organisch koolstof. Zij zullen verder worden aangeduid als fytoplankton, DOC (Dissolved Organic Carbon) en POC (Particulate Organic Carbon). In het model bestaat een essentieel verschil tussen POC enerzijds en DOC en fytoplankton anderzijds. De concentratie POC in de waterkolom is een variabele in het model; deze wordt gemodelleerd als functie van in- en uitstroming, sedimentatie en resuspensie, en sterfte van fytoplankton. DOC en fytoplankton worden niet gemodelleerd, maar als tijdreeds opgelegd.

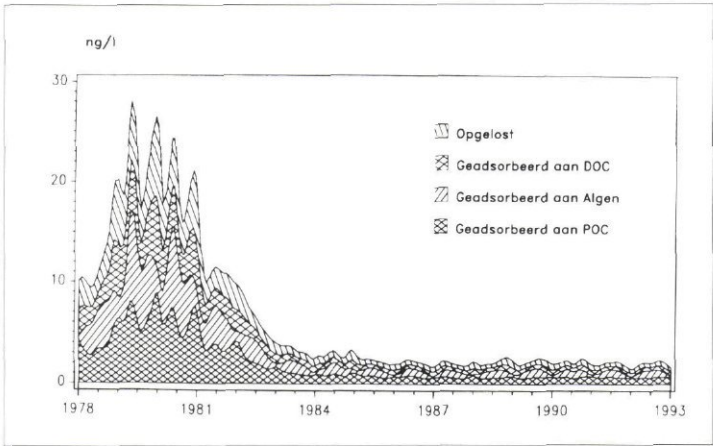
Twee andere compartimenten maken geen deel uit van het model, maar zijn wel van belang. Boven het water bevindt zich de atmosfeer, van waaruit via depositie een belasting op het aquatisch systeem kan plaatsvinden. Onder dat deel van het sediment dat gemodelleerd wordt, bevindt zich natuurlijk nog meer sediment; deze rand wordt zodanig gedefinieerd, dat geen diffusief transport van verontreiniging over het grensvlak optreedt. Begraving van sediment (met microverontreiniging) kan echter wel worden beschreven.

Afb. 7 - Schematisatie van het aquatisch systeem in het model IMPAQT.





Afb. 8 - De aanvoer van HCB door de IJssel in de jaren 1978-1987 op basis van WAK-WAL gegevens.



Afb. 9 - Gesimuleerde HCB-gehalten in het Ketelmeer.

Processen

Eveneens in afb. 6 is aangegeven welke processen in IMPAQT worden beschreven. Adsorptie en desorptie worden gemodelleerd als reversibele processen, waarbij zich momentaan een evenwicht tussen de opgeloste en de geadsorbeerde fracties instelt, op basis van de water-organisch koolstof verdelingscoëfficiënt (K_{oc}). Er wordt verondersteld dat DOC in vergelijking met POC en algen in mindere mate als adsorbent fungeert. Het belang van vervluchting wordt in het model vooral bepaald door de grootte van de constante van Henry, die de verhouding tussen de concentratie in het water en in de atmosfeer aan weerszijden van het grensvlak weergeeft. Met name voor systemen met een grote verblijftijd (zoals het IJsselmeer) kan vervluchting een belangrijk proces zijn voor organische microverontreinigingen. De afbraakprocessen fotolyse, hydrolyse en biodegradatie, waarmee een stof echt wordt omgezet en niet alleen maar naar een ander deel van het milieu wordt verplaatst, laten zich in het algemeen slecht kwantificeren. Voor veel micro-

verontreinigingen waarvan bekend is dat de afbraak in ieder geval langzaam verloopt, wordt vaak uitgegaan van een 'worst-case' benadering, door te veronderstellen dat de stof volledig persistent is. Ook de menging van het sediment en het diffusief transport in het poriewater zijn moeilijk kwantificeerbare processen; deze onzekerheden blijken echter minder beperkend te zijn voor de betrouwbaarheid van het modelresultaat (de berekende gehalten) dan de onzekerheid in bijvoorbeeld de verdelingscoëfficiënt. Mengprocessen zijn wel in hoge mate bepalend voor de snelheid waarmee een compartiment zich aanpast aan een veranderende situatie.

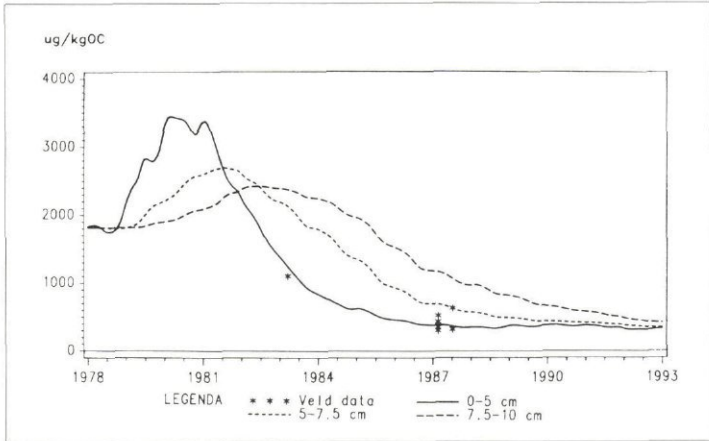
Invoer en uitvoer van het model

- Voor een simulatie met het model IMPAQT zijn de volgende invoergegevens benodigd:
- schematisatie en tijdreeksen voor hydrologie;
 - tijdreeksen voor meteorologie (wind, licht, temperatuur);
 - tijdreeksen voor algenbiomassa en (indien nodig) pH;
 - procesparameters;

- tijdreeksen voor belastingen en/of randconcentraties;
 - initiële concentraties in water en sediment;
 - algemene informatie (simulatieperiode, tijdstapgrootte, etc.).
- Als uitvoer levert het model per segment:
- het verloop van de POC concentratie in de waterkolom;
 - het verloop van de (totaal)concentratie van de gemodelleerde microverontreiniging in de waterkolom en elk van de drie sedimentlagen, met daarbij de verdeling over opgeloste en geadsorbeerde fracties.

Toepassing van het model

IMPAQT is in principe opgezet als model voor gebiedsgerichte studies op korte en middellange termijn, bijvoorbeeld 1 tot 20 jaar. De eerste toepassing die heeft plaatsgevonden betreft een haalbaarheidsstudie voor Hexachloorbenzeen (HCB) en Polychloorbiphenylen (PCB's) in het systeem Ketelmeer-IJsselmeer. Het doel van de haalbaarheidsstudie was niet in de eerste plaats het (kunnen) calibreren van het model, maar het vaststellen van tekortkomingen in gegevensbeschikbaarheid en modelformuleringen, en het uitproberen van de mogelijkheden van de modellen. Deze studie omvat onder andere een gevoeligheidsanalyse, met als doel aan het licht te brengen welke modelparameters en invoergegevens het meest van invloed zijn op de modeluitkomsten. Het bleek, dat de organisch koolstof-water verdelingscoëfficiënt en de coëfficiënt die aangeeft in welke mate opgelost organisch koolstof aan adsorptie deelneemt, de twee meest gevoelige parameters zijn. Helaas zijn dit tevens parameters die door een grote mate van onzekerheid worden gekenmerkt. Andere parameters waarvoor het model tamelijk gevoelig is, zijn de constante van Henry, de afbraaksnelheid



Afb. 10 - Gesimuleerde HCB-gehalten in de waterbodem van het Ketelmeer.

van de microverontreiniging in het sediment, en de vracht van de verontreiniging naar het systeem.

Voor de gevoeligheidsanalyse is inmiddels een vereenvoudigde versie van IMPAQT ontwikkeld, genaamd SOM-2, een analytisch model dat zeer geschikt is voor een snelle schatting van fluxen, gehalten en aanpassingstijden van organische microverontreinigingen in aquatische systemen.

Om de toepassingsmogelijkheden van IMPAQT te onderzoeken is een aantal berekeningen uitgevoerd. Voor een van die berekeningen zijn in de afb. 9 en 10 resultaten voor HCB in het Ketelmeer gepresenteerd. Het betreft een reconstructie van het concentratieverloop van HCB in water en sediment over de periode 1978-1987 op basis van de belasting over die periode (zie afb. 8), gevolgd door een voorspelling voor de jaren 1988-1992, uitgaande van het 'stand still' principe, waarbij de belasting constant is gehouden op 134 gram HCB per dag. Uitgezet zijn de concentratie in de drie sedimentlagen, en de totale concentratie in het water met de verdeling daarvan over vier fracties.

Evaluatie

Op grond van de haalbaarheidsstudie zijn ten aanzien van de toepassingsmogelijkheden van het model IMPAQT de volgende conclusies getrokken.

1. Het model voldoet goed voor wat betreft het vergroten van het inzicht in de problematiek, en de terugkoppeling naar laboratorium- en veldonderzoek.
2. De mogelijkheden van het model voor het maken van kwantitatieve prognoses zijn veelbelovend, maar worden (nog) beperkt door met name de beschikbaarheid van voldoende betrouwbare procesparameters en, meer nog, van voldoende meetgegevens voor calibratie en verificatie van het model.

Het bio-accumulatiemodel UPTAQE

De ontwikkeling van het bio-accumulatiemodel UPTAQE (Uptake of Toxic compounds in Aquatic Ecosystems) is gebaseerd op de analyse van de problematiek rond de verspreiding van microverontreinigingen in het milieu zoals is besproken in de inleiding. Op basis van deze analyse is een inventarisatie gemaakt van de eisen aan welke het te formuleren model moest voldoen. Als belangrijkste doelen werden de volgende punten geformuleerd:

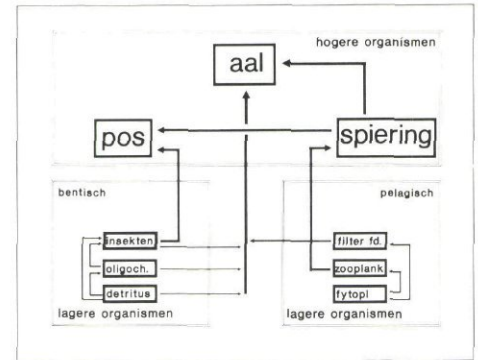
- Het modelleren van accumulatie van microverontreinigingen in aquatische organismen.

- Berekening van de specifieke opname door een organisme van een stof uit het (a)biotische milieu.
- Berekening van voedselketeneffecten voor toppredatoren.
- Beschrijving van alle relevante processen welke leiden tot opname en accumulatie door organismen.

Tot eind 1987 is de ontwikkeling van UPTAQE voornamelijk gericht geweest op het modelleren van accumulatie van organische hydrofobe verbindingen. In een literatuurstudie is een analyse gemaakt van de beschikbare procesinformatie en reeds bestaande modellen (Glas e.a., 1986). Op basis hiervan is gekozen voor de huidige opzet van UPTAQE. Hierbij is als meest belangrijke criterium de mogelijkheid tot calibratie van gebruikte processen en de algemene toepasbaarheid gehanteerd. Dit had tot gevolg dat niet altijd gebruik is gemaakt van formuleringen op basis van proceskennis, maar van formuleringen, welke met beschikbare experimentele gegevens konden worden gecalibreerd. Uiteindelijk zijn de volgende processen in het model opgenomen:

- Groei, respiratie en consumptie.
- Opname van stof via de kieuwen.
- Opname van stof via het maag/darmkanaal.
- Excretie en metabolisatie.

In de volgende paragrafen zullen de genoemde processen nader worden toegelicht. Omdat het model per definitie een simplificatie van de werkelijkheid is, dient men zich te realiseren dat niet alle bestaande processen in het model zijn



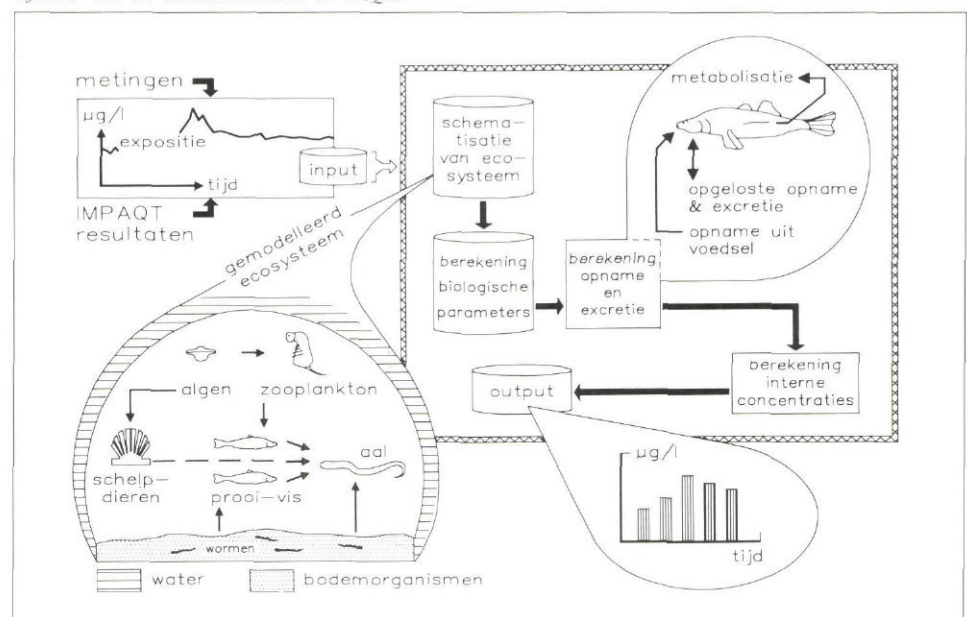
Afb. 11 - Voedselketenstructuur zoals toegepast in het model UPTAQE voor paling in het Ketelmeer.

opgenomen. Er is een afweging gemaakt tussen de complexiteit van de processen en de beschikbaarheid van procesgegevens. Met name door de onbekendheid met het gedrag van de gemodelde hogere organismen is er geen mogelijkheid in het model gerealiseerd, waarbij deze organismen migreren naar locaties met een andere blootstelling. In de gepresenteerde versie van UPTAQE zijn geen formuleringen opgenomen, die de actieve opname van anorganische microverontreinigingen beschrijven. Het model is in eerste instantie opgezet voor het modelleren van bio-accumulatie in vissen op een hoger niveau in de voedselketen, zoals paling. Inmiddels is ook een versie gereed welke opname van koper, cadmium en zink in mosselen beschrijft.

Bio-accumulatie

Bij het modelleren van hydrofobe organische verbindingen in UPTAQE is van het principe uitgegaan dat slechts passief transport van stof de basis is voor

Afb. 12 - Het bio-accumulatiemodel UPTAQE.



opname en excretie. Dit uitgangspunt is gekozen op basis van huidige wetenschappelijke kennis. Op grond van literatuur is aangenomen dat de accumulatie van deze groep van stoffen wordt bepaald door een beperkt aantal chemische stoffeigenschappen, namelijk de octanol-water verdelingscoëfficiënt (K_{ow}), overdrachtscoëfficiënt en molecuulgrootte. Opgemerkt wordt dat bij het modelleren van de accumulatie van stoffen met andere chemische eigenschappen ook andere (actieve) processen en stoffeigenschappen een rol kunnen spelen. Bij de berekening van interne concentraties voor de gemodelleerde organismen maakt het model onderscheid tussen 'lagere organismen', welke steeds in evenwicht zijn met hun omgeving en 'hogere organismen', waarvoor dit niet zonder meer geldt. De aanname van het bestaan van evenwicht maakt het gebruik van eenvoudige formuleringen mogelijk. De verhouding tussen opname- en verliesprocessen, die bepaald wordt door de K_{ow} , is voor deze organismen de directe basis voor de berekening van interne concentraties.

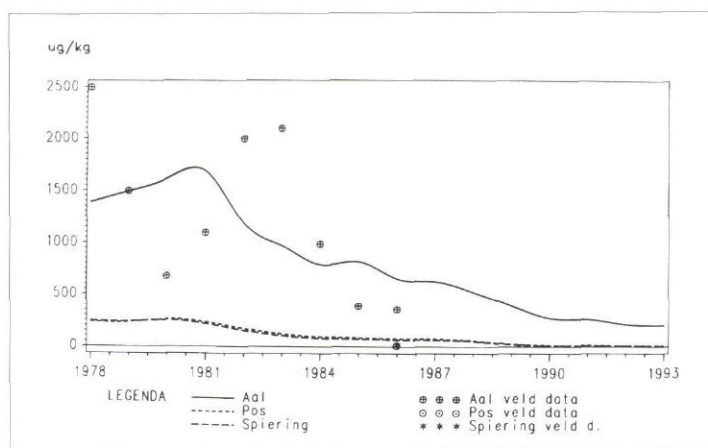
Structuur van het model

De gewenste brede toepasbaarheid van het model heeft geleid tot de volgende opzet. De schematisering van de voedselketen kan willekeurig worden opgegeven op basis van aantal soorten die gegeten worden en de bijbehorende voorkeur van de eters (predatoren). Tijdens de simulatie wordt voor elke gemodelleerde soort een gewogen gemiddelde concentratie toxische stof in voedsel berekend. Naar keuze van de gebruiker van het model kunnen processen worden ge(de)activeerd. Hierbij kan worden gekozen tussen verschillende opnameformuleringen, groei-formuleringen en berekening van evenwichtsconcentraties.

Haalbaarheidsstudie

Teneinde het model te testen is een haalbaarheidsstudie uitgevoerd, waarbij de accumulatie van PCB en HCB in de voedselketen van paling in het Ketelmeer is gesimuleerd. Hierbij is gebruik gemaakt van de door IMPAQT berekende concentraties in water en sediment. De benodigde invoer van het model bestaat onder andere uit procesconstanten en startwaarden voor procesparameters. Hierbij gaat het om coëfficiënten die in grote mate soortspecifiek zijn. Het bleek niet mogelijk om deze coëfficiënten in te vullen voor alle gemodelleerde soorten, waar nodig is een schatting gemaakt van de waarde van de betreffende coëfficiënt. Benodigde groeisnelheden en vetgehaltes

Afb. 13 - Gesimuleerde HCB-gehalten in paling in het Ketelmeer.



zijn ontleend aan gegevens van het RIVO. De voedselketen die in de haalbaarheidsstudie is gebruikt, is ten dele gebaseerd op gegevens van het RIVO. Door gebrek aan informatie is ook hier ten dele gewerkt met schattingen. De geschematiseerde voedselketen (afb. 11) biedt de mogelijkheid om inzicht te verkrijgen in de bijdrage van bodemdieren aan accumulatie op hogere trofische niveaus waardoor de rol van verontreinigde sedimenten kan worden geanalyseerd.

Een gevoeligheidsanalyse toonde aan dat de modelresultaten in hoge mate worden bepaald door de waarde van de partiticoëfficiënt, extractie- en opnamecoëfficiënten en coëfficiënten die de respiratiesnelheid beïnvloeden. Geconcludeerd werd dat een verhoging van de K_{ow} resulteerde in hogere geaccumuleerde concentraties met een vergrote bijdrage van de opname uit voedsel aan de totale opname. Hierbij liepen de bioaccumulatiefactoren op tot > 100.000 voor paling. Deze waarden, welke de evenwichtssituatie benaderen, werden na ongeveer 180 dagen bereikt. De berekeningen tonen een duidelijk voedselketeneffect aan, waarbij elk trofisch niveau ongeveer een 5-10 maal hogere accumulatiewaarde bereikt. Voor hogere organismen was de bijdrage uit voedsel aan de totale opname uiteindelijk meer dan 70%. De veldmonsters die voor spiering en pos in augustus 1987 zijn verzameld bevatten 15-30 $\mu\text{g/kg}$ w.w. HCB voor twee lengteklassen. De berekende concentraties liggen in de range van 40-80 $\mu\text{g/kg}$ w.w. Geconcludeerd wordt dat de resultaten van het model, ondanks onzekerheden betreffende de werkelijke waarden voor enige coëfficiënten, een goede overeenkomst vertonen met de veldgegevens. De in afb. 13 gepresenteerde resultaten zijn gebaseerd op concentraties welke voor 1987 berekend zijn met IMPAQT.

Het is eveneens mogelijk om concentratietijdreeksen in te lezen in UPTAQE.

Evaluatie

Het is duidelijk dat nog veel detailkennis ontbreekt voor een nauwkeurige modellering van de accumulatie van microverontreinigingen in aquatische ecosystemen. Wel kan geconcludeerd worden dat het bestaan van voedselketenrelaties waarin bodemorganismen voorkomen, leidt tot een verhoogde accumulatie in hogere organismen, wanneer van vervuilde sedimenten sprake is. In eerste instantie is het gewenst dat meetgegevens beschikbaar komen die de mogelijkheid scheppen om modelresultaten van UPTAQE te calibreren. Dit geldt in het bijzonder voor de gemodelleerde bodemdieren. Bovendien zijn de voedselrelaties tussen bodemorganismen onderling en relaties met hogere organismen (met name vissen) niet voldoende duidelijk. Aangezien het gemodelleerde aantal trofische niveaus van belang is voor de modelresultaten dient hieraan aandacht te worden besteed. Met behulp van de huidige procesformuleringen is het mogelijk om veldgegevens te reproduceren, en aan te geven wat de blootstellingsroutes zijn voor aquatische organismen. Gezien de beperkte proceskennis is het op dit moment niet zinvol om een modelconcept te ontwikkelen waarin gedetailleerder procesformuleringen zijn opgenomen. De mogelijkheid om een dergelijk model toe te passen voor andere stoffen wordt hierdoor wel aanzienlijk beperkt. Met name de ontwikkeling van algoritmes die stoffeigenschappen relateren aan biologische parameters behoeft nadere studie. Een logisch vervolg op de ontwikkeling van UPTAQE is de ontwikkeling van een dosis-effect model dat interne concentraties relateert aan mogelijke effecten op korte en lange termijn.

Literatuur

- Bruggeman, W. A. (1983). *Bioaccumulation of polychlorobiphenyls and related hydrophobic chemicals in fish*. Proefschrift Universiteit van Amsterdam. RIZA, Lelystad.
- Bruggeman, W. A., Kerkhoff, M. A. T. en Wegman R. C. C. (1985). *Organische microverontreinigingen in onderwaterbodems: verspreiding en bioaccumulatie*, in: V. W. J. van den Bergen e.a. (red.) *Onderwaterbodems, rol en lot*. Proc. Symp. Rotterdam, KNCV sectie Milieuchemie, 's-Gravenhage, p. 57-71.
- Glas, P. C. G., Stutterheim, E. en Wildschut, M. A. (1986). *Ontwikkeling modelinstrumentarium microverontreinigingen in aquatische systemen, deel 2: Mathematische modellering van de accumulatie van microverontreinigingen in aquatische organismen: een literatuurstudie*. TOW rapport R2228, Waterloorkundig Laboratorium, Delft.
- Kerkhoff, M. A. T., e.a. (1986a). *De PCB verontreiniging van rode aal: trends in chloorbifenyln gehalten (1977-1985)*. MO 86-01, RIVO, IJmuiden.
- Kerkhoff, M. A. T., e.a. (1986b). *Negen jaren van organochloor-pesticiden onderzoek in rode aal*. MO 86-02, RIVO, IJmuiden.
- Koenders, J. (1982). *Het voedsel van rode aal in het IJsselmeer, relatie hiervan met bodemfauna en kopvorm*. RIVO-rapport, ZA 82-02.
- Smits, J. G. C., Stutterheim, E. en Vries, D. J. de (1986). *Ontwikkeling modelinstrumentarium microverontreinigingen in aquatische systemen, deel 1: Aanzet tot modellering van organische microverontreinigingen in meren*. TOW rapport R2231. Waterloorkundig Laboratorium, Delft.
- Vries, D. J. de (1987). *IMPAQT: A physico-chemical model for the fate of hydrophobic organic micro-pollutants in aquatic systems, model description*. Waterloorkundig Laboratorium, Delft.
- Vries, D. J. de, and Vries, M. B. de (1988). *Modelling the fate of HCB and PCB 153 in the lakes Ketelmeer and IJsselmeer; results of a feasibility study*. TOW-IW Report, Delft Hydraulics, Delft.
- Vries, M. B. de, and Goossens, H. (1987). *UPTAQE - A model for calculating transfer of hydrophobic organic micro-pollutants in aquatic food-chains, model description*. Waterloorkundig Laboratorium, Delft.

Rapport over kleinschalige zuiveringssystemen gepubliceerd (ISBN 90346 17076)

In de Publikatiereeks Milieubeheer van het Ministerie van VROM is een rapport gepubliceerd betreffende de resultaten van enkele jaren praktijkonderzoek aan 14 kleinschalige zuiveringssystemen (5-200 i.e.).

Naast de beschrijving van de onderzoekslocaties en de toegepaste systemen wordt in dit rapport ingegaan op de zuiveringsresultaten, de bedrijfsaspecten, de invloed op het ontvangende oppervlaktewater en de kosten. Tevens is gerapporteerd over enige specifieke onderzoeken als fosfaatvrij wassen en denitrificatiemogelijkheden. De belangrijkste conclusie uit het rapport is dat kleine zuiveringssystemen qua zuiveringsrendement niet onder behoeven te doen voor grote systemen.

Per onderzoekobject is gedetailleerde informatie vastgelegd in 14 'locatierapporten'. Deze locatierapporten zijn verkrijgbaar bij Witteveen + Bos, Raadgevende Ingenieurs te Deventer. Het hoofdrapport is tegen betaling van f 40,- schriftelijk te bestellen bij Staatsuitgeverij/DOP, Postbus 20014, 's-Gravenhage onder vermelding van het ISBN-nummer en een afleveringsadres. Op basis van de onderzoeksresultaten wordt momenteel gewerkt aan het opstellen van concept-richtlijnen ten aanzien van ontwerp, uitvoering, onderhoud en beheer van systemen voor individuele behandeling van afvalwater. Nadere informatie is verkrijgbaar bij het Directoraat-Generaal Milieubeheer, ir. G. Martijnse.

Sterk vervuilde waterbodems bedreigen ook dierenwereld

Sterk vervuilde waterbodems bedreigen via verstoring van het ecosysteem ook de dierenwereld in dergelijke gebieden. Dit soort vervuilde waterbodems komen bijvoorbeeld voor in de Biesbosch, de Nieuwe Merwede en de Amer, en in mindere mate in het Hollandsch Diep en het Haringvliet. Onderzoek heeft uitgewezen dat visetende vogels zich in die gebieden veel minder goed voortplanten. Ook vertonen ze groeiremmingen en een veel grotere sterfte. Resultaten van onderzoeken waaruit dit is gebleken werden onlangs in Rotterdam gepresenteerd door drs. J. Kuijpers van de Directie Zuid-Holland van Rijkswaterstaat tijdens een door TNO georganiseerd symposium over de waterkwaliteit in het Deltagebied.

Via de vervuilde bodems komen tal van schadelijke stoffen terecht in waterorganismen, waarna ze worden opgenomen door vissen die uiteindelijk weer worden gegeten door visetende vogels. Zo is uit onderzoek gebleken dat eieren van futen in de Biesbosch tienmaal zoveel PCB's bevatten dan de eieren van futen in schone gebieden in Noord-Holland. De geboorte van jonge aalscholvers blijkt in de Biesbosch, het gebied met een van de meest verontreinigde bodems in Nederland, veel lager te liggen dan in gebieden met schone waterbodems. In schone gebieden in Friesland schommelt het aantal jonge aalscholvers rond de twee per legsel, terwijl dat in de Biesbosch op ongeveer een halve aalscholver per legsel ligt. Kuijpers vindt dat bij de Nieuwe Merwede, de Amer en de Biesbosch de sanering urgent is. Op de bodem

van het Hollandsch Diep wordt de sterk verontreinigde laag in toenemende mate afgedekt door schoner slib, omdat het nieuwe bezinksel minder vervuild is als gevolg van de afname van de lozingen in de Rijn. Op de bodem van het Haringvliet bevindt zich slechts een dunne verontreinigde laag bezinksel.

De bodems van Volkerak, Zoommeer, Oosterschelde en Grevelingen zijn vrijwel niet vervuild. Alleen in een aantal haventjes zou sanering nodig zijn. De afzet van slib in de riviermondingen is sterk vergroot als gevolg van de Deltawerken, waardoor de stroomsnelheid van de rivieren op een aantal plaatsen afnam. De grotere mate van bezinking was destijds wel voorzien, maar men heeft zich bij Rijkswaterstaat destijds niet gerealiseerd dat het dan wel om zeer verontreinigd slib zou gaan.

Volgens Kuijpers is het in ieder geval nodig dat de verontreinigde componenten in het bezinksel zodanig worden teruggebracht dat het slib past in een normaal ecosysteem. Dat betekent volgens Kuijpers dat de lozing in de Rijn van stoffen als cadmium, zink en koper met 90% moet worden teruggebracht. Voor andere stoffen is een teruggang met 50% voldoende. Daarmee gaat hij een stuk verder dan het Rijn-Actieprogramma, waarin de ministers van de Rijnsoeverstaten in 1987 afspraken dat de lozing van alle verontreinigde stoffen in de Rijn in 1995 vergeleken met 1985 tot de helft moet zijn teruggebracht. (ANP)

BASF investeert in milieu:

60 miljoen voor nieuw ecologie-laboratorium

BASF AG gaat een nieuw laboratorium voor ecologie bouwen en investeert daarin 60 miljoen DM. Met de werkzaamheden zal in de zomer van dit jaar worden begonnen. Het gebouw van 45.000 m³ zal in het voorjaar van 1991 gereed zijn. In dit ecologie-laboratorium zullen circa 100 medewerkers gaan werken. Tot de belangrijkste taken van het laboratorium voor ecologie behoort het biologisch-, ecologisch- en milieu-analytisch onderzoek van afzonderlijke stoffen, produkten en afvalwater. Met de research en ontwikkeling op dit terrein houdt BASF AG zich al sinds de jaren zestig bezig.