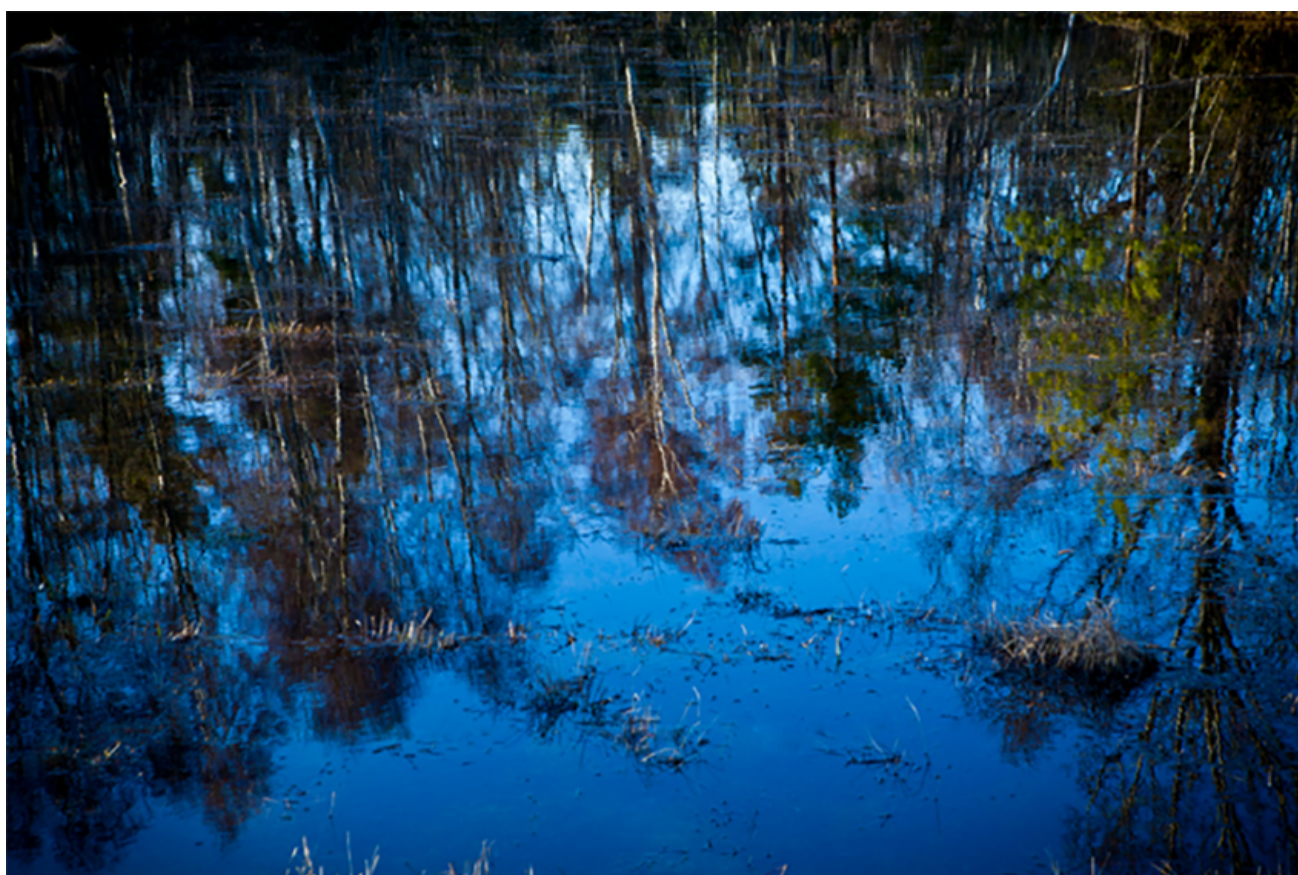


# Modelleringsverktyg för metaller och miljögifter i akvatisk miljö

Resultat från en inventering



Den här rapporten har tagits fram av Havs- och vattenmyndigheten.  
Myndigheten ansvarar för rapportens innehåll och slutsatser.

Havs- och vattenmyndigheten  
Datum: 2018-10-30

Omslagsfoto: Maja Kristin Nylander  
ISBN 978-91-88727-23-7

Havs- och vattenmyndigheten  
Box 11 930, 404 39 Göteborg  
[www.havochvatten.se](http://www.havochvatten.se)

# Modelleringsverktyg för metaller och miljögifter i akvatisk miljö

Resultat från en inventering

---

Havs- och vattenmyndighetens rapport 2018:32



# Förord

Syftet med denna kunskapssammanställning är att översiktligt beskriva idag tillgängliga modellverktyg för akvatisk miljö. Även några luftmodeller ingår.

DHI Sverige AB fick under 2017 av Havs- och vattenmyndigheten (HaV) i uppdrag att inventera och översiktligt granska idag tillgängliga modelleringsverktyg för miljögifter i akvatisk miljö, med tänkbar användning inom vattenförvaltningen. Som stöd för granskningen erhöll DHI ett antal frågor om respektive verktyg och som skulle besvaras i den mån det var möjligt. Frågorna togs fram av HaV men i samråd med enskilda handläggare på vattenmyndigheter och beredningssektariat.

Resultatet av inventeringen publicerades inte av DHI i en fristående rapport, utan främst i tabulerad form, allt i enlighet med HaVs önskemål. Huvudfokus för DHIs inventering var att identifiera modelleringsverktyg för akvatisk miljö. De modeller som identifierades redovisas i denna rapport och samtliga beskrivs kortfattat. DHI har inte haft i uppdrag att testköra modelleringsverktygen och detta har inte heller gjorts av HaV. Det har inte varit möjligt inom tidsramen och vissa verktyg är inte heller fritt tillgängliga.

IVL kontaktades också för att få med även några verktyg som är tillgängliga för att uppskatta belastning på akvatisk miljö från utsläpp som sker till luft.

Den här rapporten har tagits fram av Ann-Sofie Wernersson, utredare på Havs- och vattenmyndigheten. Myndigheten ansvarar för rapportens innehåll och slutsatser. Vi har dock i huvudsak utgått från det underlagsmaterial som tillhandahållits från DHI och IVL.

Rapporten är en kunskapssammanställning för att underlätta vidare analys och ställningstagande. Resultatet av inventeringen ska inte ses som en komplett sammanställning av alla idag tillgängliga modellverktyg för akvatisk miljö. Att en modell ingår i rapporten ska inte heller tolkas som att HaV rekommenderar den. Användaren av en viss modell behöver själv ta ställning till om den är användbar i en specifik situation samt ytterligare utreda vilka osäkerheter som är förknippade med den och de resultat som erhålls.

Göteborg den 30 oktober 2018 Mats Svensson

BAKGRUND .....	8
TILLGÄNGLIGA MODELLERINGSVERKTYG FÖR MILJÖGIFTER I AKVATISK MILJÖ ....	8
Modeller för olika typer av ändamål.....	11
Uppskatta halter av metaller och miljögifter i olika matriser.....	11
För forskningsändamål.....	12
För tillämpning inom vattenförvaltning i enskilt medlemsland .....	12
Tillämpning inom kemikalielagstiftning .....	13
Under utveckling .....	13
Förorenad mark.....	13
Plymer.....	14
Spill.....	14
Dagvatten.....	14
Spridningsmodeller för luft .....	14
REFERENSER .....	14
BILAGA .....	18
Modeller för akvatisk miljö.....	18
AQUATOX .....	18
CORMIX .....	18
EUSES.....	19
GEMCO.....	19
GREAT-ER.....	20
INCA .....	20
”Länens GIS analys” .....	21
MACRO-SE.....	21
MARMAK .....	22
MIKE + ECO-LAB.....	22
”Miljögiftsmodellen” .....	23
MoRE.....	23
NET modellen.....	23
QWASI .....	24
Riktvärdesmodellen.....	25
SAGIS.....	25
SIMPLE BOX .....	26
STORMTAC .....	26
STREAM-EU.....	26
TELEMAC.....	27
TRIM-FATE.....	27
wPRISMA och wPOLIS.....	28

Luftmodeller .....	28
TAPM (The Air Pollution Model) .....	28
ADMS.....	29

# Bakgrund

Syftet med denna kunskapssammanställning är att översiktligt beskriva idag tillgängliga modellverktyg som skulle kunna vara användbara i t.ex. vattenförvaltningsarbetet, vid identifiering av vattenförekomster där det föreligger en risk för att status inte är god och det därför behövs uppföljande undersökningar och analyser. DHI Sverige AB fick under 2017 av Havs- och vattenmyndigheten i uppdrag att inventera och översiktligt beskriva befintliga modellverktyg som idag finns tillgängliga för detta syfte. Som stöd för detta erhöll DHI ett antal frågor om respektive verktyg och som skulle besvaras i den mån det var möjligt inom tidsramen och utifrån lätt tillgänglig information. Frågorna togs fram av HaV men i samråd med enskilda handläggare på vattenmyndigheter och beredningssekretariat<sup>1</sup>.

De modeller (29 stycken) som identifierades av DHI redovisas i denna rapport och samtliga beskrivs kortfattat. De flesta modelleringsverktyg som befunnits vara idag tillgängliga beskrivs sedan något närmre (se bilagan). Detta gäller i synnerhet de modellverktyg som kan användas för att uppskatta halter av metaller och miljögifter i sediment, vatten och biota.

Även modeller som inte är med i sammanställningen kan vara användbara inom vattenförvaltningen och vissa av modellerna i den här rapporten är kanske även, eller främst, användbara i andra sammanhang såsom provning och tillsyn i ett enskilt fall.

Rapporten är en kunskapssammanställning för att underlätta vidare analys och ställningstagande. Användaren av en viss modell behöver själv ta ställning till om den är användbar i respektive sammanhang samt ytterligare utreda vilka osäkerheter som är förknippade med den och de resultat som erhålls.

## Tillgängliga modelleringsverktyg för miljögifter i akvatisk miljö

De modellverktyg som initialt identifierades inom ramen för uppdraget framgår av tabell 1 nedan. Tabell 1 har också med en kortfattad beskrivning av för vilket syfte modellen utvecklades och av vilken organisation.

I inventeringssteget valdes en bred ansats för att få med så många modeller som möjligt. I sammanställningen ingår därför både verktyg som avser att bedöma ämnens spridning i den akvatiska miljön och sådana som avser att uppskatta belastning (emissioner) och i vissa fall en kombination av båda. Uppdraget omfattade dock inte att även ha med modellverktyg som t.ex. används för att beräkna biotillgänglig koncentration.

<sup>1</sup> Frågorna berörde bl.a. följande aspekter: ämnesgrupper som kan bedömas, data som krävs av användare, vilken information ingår i modellen, vad levereras (t.ex. uppskattad koncentration?), verifiering som gjorts, osäkerheter, avgränsningar (t.ex. tillämpbarhet för viss matris, ämnesgrupp eller typ av miljö), komplexitet och tillgång till manual, tillgänglighet och eventuella licenskrav samt användning hittills.



Sammanställningen är främst tänkt att ge en överblick över vilka olika typer av modeller som finns i dagsläget. Notera att det kan finnas ytterligare modelleringsverktyg tillgängliga för samma ändamål men som inte identifierades inom ramen för uppdraget och nya kan ha utvecklats.

Tabell 1. Modelleringsverktyg som identifierats av DHI i samband med inventeringssteget samt information om när modellen utvecklades och av vilken organisation, om sådan information har varit lätt tillgänglig. Respektive modell beskrivs kortfattat avseende syfte och tänkt användningsområde. Modellerna har ordnats i bokstavsordning. POP=Persistenta organiska ämnen.

<b>Modellnamn</b>	<b>Organisation (utvecklare) och utvecklingsår (om känt)</b>	<b>Syfte med verktyget</b>
AQUATOX	US EPA, 1990 (2014)	Uppskattar spridning av föroreningar på lokal och regional nivå, till vatten, sediment och biota.
Base flow index	SLU	Indexberäkning för bedömning av spridningsrisk av bekämpningsmedel från jordbruksmark. Under utveckling.
CalTox	California department of toxic substances control, 1993	Toxikologiska riskbedömningar vid förorenad mark men har även med komponenter som berör yt- och grundvatten, sediment och luft. Äldre modell.
CHEMMAP	RPSASA, 2001 (2016)	Uppskattar spridning och biologiska effekter i marin miljö vid kemikaliespill (organiska och oorganiska ämnen) från havsbaserade transporter.
CORMIX	MixZonInc, 2017	Beräknar initial utspädning (i 3D) från en utsläppspunkt i omgivande vatten, minut för minut. Kommersiell.
EUSES	RIVM 1997 (2004)	Används på EU nivå för att uppskatta halter av ämnen i vatten och sediment vid riskbedömningar av allmänkemikalier (REACH) och aktiva substanser i biocider.
GEMCO	Deltares, 2003.	Uppskattar halter i vatten, sediment och biota (även näringsvävar). Tillämpbar för estuarier och angränsande marina vatten.
GREAT-ER	Cefic, 1999 (2011; 2015)	Uppskattar halter i vatten i vattendrag vid utsläpp från en eller flera punkter, såsom industriutsläpp eller reningsverk.
INCA	Reading university	Verktygsgrupp för att på avrinningsområdesnivå uppskatta vattenkvalitetsrelaterade parametrar såsom näringsämnen men även kvicksilver ("INCA-Mercury") och andra metaller ("INCA-Metals"; omfattar As, Pb, Cd, Cu, Ni, Cr, Mg, Mb), och organiska miljögifter.
LEEDS/ STELLA	IVL	Beräknar spridning och fördelning av ämnen i fisk, sediment och vatten. Forskningsmodell.
"Länens GIS-analys"	Länsstyrelsen Värmland m.fl., 2008	GIS-analys i kombination med poängsättning av olika typer av påverkanstryck (markanvändning) för att identifiera vattenförekomster där det behövs uppföljande övervakning. Utvecklades och användes under första förvaltningscykeln i några län.
MACRO-SE (och MACRO-DB)	SLU, 2005	Beräknar läckage av kemiska växtskyddsmedel från jordbruksmark till grund- och ytvatten. Framtagen för bekämpningsmedelsanvändning på jordbruk och trädodlingar på naturlig mark (åker). Ej för skog eller t.ex. handelsträdgårdar.
MARMAK	IVL	Beräknar plymer av t.ex. avloppsvatten och kylvatten.
MIKE + ECOLAB	DHI, 2017	Används för spridningsberäkningar vid t ex tillståndprocesser och vid större utsläpp/olyckor. MIKE finns i flera versioner och kan beräkna spridning av vattenlösliga ämnen och partikelbundet. Om ECOLab påkopplas möjliggörs även uppskattning av halter i sediment och biota. Kan användas på olika geografisk skala och för både marin och limnisk miljö. Kan även uppskatta sedimentspridning.

<b>Modellnamn</b>	<b>Organisation (utvecklare) och utvecklingsår (om känt)</b>	<b>Syfte med verktyget</b>
"Miljögiftsmodellen"	IVL och SMHI, 2013	Utvecklades med syfte att ligga till grund för påverkansanalys inom vattenförvaltningen under den andra förvaltningscykeln.
MOIRA	Uppsala universitet, 1998	Uppskattar hur radioaktiva ämnen uppträder i akvatiska system och hur dessa system svarar på olika åtgärder. Forskningsprojekt.
MoRE	Karlsruhe Institute of Technology (KIT), 2000	Används i Tyskland för att på årsbasis uppskatta belastning på avrinningsområdesnivå och för vattendrag. Används som underlag för Tysklands inrapportering av register för utsläpp och spill.
NET	SMHI	Bedömer hur vattenburna ämnen sprids.
POPCYCLING-Baltic	NILU, 2000	Uppskattar var POPs tar vägen (vilka matriser) i Östersjön. Forskningsmodell.
QWASI	Trent university, 2002 (2007)	Uppskattar halter i sediment, luft och vatten av enskilda organiska ämnen i främst sjöar (vid "steady state").
Riktvärdesmodellen	Naturvårdsverket 2009 (2016)	Framtagen för att beräkna platsspecifika riktvärden för förorenad mark. Kan göra även mycket grova uppskattningar av halter i kontaktmedier såsom ytvatten (vattendrag eller sjö).
SAGIS	Environment Agency	Används i Storbritannien för att uppskatta olika källors (12 kategorier) belastning. Kommersiell.
Simple Box	RIVM, 1993 (2016)	Uppskattar fördelning av ett ämne mellan olika matriser (luft, vatten, sediment, jord och biota).
StormTAC	SWECO Environment, Stockholm, 2001 (2017)	Framtagen för dagvattenhantering och hårdgjorda ytor. Kommersiell.
STREAM-EU	Deltares	Uppskattar var organiska miljögifter hamnar i stor skala. Forskningsmodell.
TELEMAC	2017	Används för spridningsberäkningar vid t ex tillståndprocesser i Sverige. Kan även uppskatta sedimentspridning.
TRIM.FaTE	USEPA, 1997 (2005)	Uppskattar halter i luft, jord, sediment, grundvatten och biota (på olika trofinivåer och för pelagiska och bottenlevande organismer), i sjöar och vattendrag.
wPRISMA, och wPOLIS	2013 (2017)	Interaktivt kartverktyg som används i Grekland för att identifiera vattenförekomster där det förekommer betydande påverkanstryck.

## Modeller för olika typer av ändamål

Nedan kategoriseras de olika modellerna utifrån deras ändamål och tillämpbarhet, med utgångspunkt från den insamlade informationen.

### Uppskatta halter av metaller och miljögifter i olika matriser

Flera av de identifierade modelleringsverktygen kan användas för att uppskatta vilka halter av ett ämne som kan uppstå i sediment, vatten och/eller biota, se tabell 2. Några av dessa är enkla att använda medan andra kräver modelleringsexpertis. Några är också mer ”exakta” och beaktar många olika typer av processer (t.ex. biologisk och abiotisk nedbrytning, speciering, sedimentation, resuspension osv.) men kräver då också ofta stora mängder indata<sup>2</sup>, inte bara för utsläppet utan även den specifika miljö som ska modelleras, väderförhållanden etc. Några är därför tillämpbara i ett initialt skede för att få en grov uppskattning och för många områden, medan andra är användbara vid en fördjupad och mer detaljerad analys i ett enskilt fall. Samtliga i tabell 2 ingående modeller beskrivs ytterligare i bilagan.

Fokus här är på modeller som kan användas för att uppskatta halter på regional eller lokal nivå även om några också kan användas för mer storskaliga bedömningar. Alla modeller i inventeringssteget (tabell 1) och som kan användas för att uppskatta halter i olika matriser ingår därför inte. Modeller som främst är tänka att användas inom forskning eller ännu inte är färdigutvecklade ingår inte, se nedan. EUSES, som används vid kemikalieriskbedömningar på EU-nivå och STREAM-EU samt verktyg som undersöker utbredning av plymer beskrivs också närmre nedan och i bilagan men ingår inte i tabellen.

Tabell 2. Exempel på befintliga modelleringsverktyg för att uppskatta ungefärliga halter i vatten, sediment och/eller biota. Av de mer utförligare beskrivningarna i bilagan framgår vidare om ett verktyg fungerar bättre för vissa ämnesgrupper, matriser eller kategorier av vatten (sjö, vattendrag eller marin miljö).

Matris	Sjö	Vattendrag	Marin miljö
Vatten	QWASI (långsiktig koncentration)	QWASI (långsiktig koncentration)	QWASI (fjordar; långsiktig koncentration)
	TRIMfate	TRIMfate	GEMCO (estuarier; organiska ämnen)
	INCA (prognoser över tid)	AQUA-TOX	AQUA-TOX
	AQUA-TOX	MACRO-SE (växtskyddsmedel från åkermark)	MIKE-ECOLAB
	MACRO-SE (växtskyddsmedel från åkermark)	MIKE-ECOLAB	SIMPLE-BOX
	MIKE-ECOLAB	GREAT-ER	
	SIMPLE-BOX	SIMPLE-BOX	
	TELEMAC	TELEMAC	

<sup>2</sup> I vissa fall finns dessa redan inbyggda i databaser i verktyget.

<b>Matris</b>	<b>Sjö</b>	<b>Vattendrag</b>	<b>Marin miljö</b>
Sediment	QWASI TRIMfate AQUA-TOX MIKE-ECOLAB SIMPLE-BOX	QWASI TRIMfate AQUA-TOX MIKE-ECOLAB SIMPLE-BOX	QWASI (fjordar) GEMCO (estuarier; organiska ämnen) AQUA-TOX MIKE-ECOLAB SIMPLE-BOX
Biota	AQUA-TOX MIKE-ECOLAB SIMPLE-BOX	AQUA-TOX MIKE-ECOLAB SIMPLE-BOX	GEMCO (estuarier; organiska ämnen) AQUA-TOX MIKE-ECOLAB SIMPLE-BOX

## För forskningsändamål

Några av modellerna i tabell 1 har främst använts inom forskningsprojekt och har därför troligen en begränsad tillämpbarhet inom t.ex. vattenförvaltning, åtminstone i dagsläget. Hit hör t.ex. LEEDS/STELLA (komplex modell och hittills forskningsfokus), STREAM-EU (forskningsmodell och relativt komplex att använda), POPCYCLING-Baltic (forskningsändamål)<sup>3</sup>, CoZMo-POP (Coastal Zone Model for POPs, forskningsändamål)<sup>4</sup> och MOIRA<sup>5</sup>.

LEEDS/STELLA är en fate och transportmodell och som inkluderar fisk, sediment och vatten för persistenta ämnen och tungmetaller men det är oklart vilka processer som ingår utöver sedimentation. Verktöget har använts bl.a. för modellering av PCDD/Fs i en bukt i Östersjön, Kallrigafjärden (Karlsson et al 2010) och för modellering av effekter vid olika åtgärder (muddring, täckning mm) för PCB i Oxundasjön inom ramen för ett examensarbete (Hållén 2016).

STREAM-EU skulle kunna vara användbar inom vattenförvaltning men främst för storskaliga bedömningar och modelleringsexpertis behövs. Modellen beskrivs vidare i bilagan. I övrigt beskrivs inte ovanstående modellverktyg ytterligare i denna rapport.

## För tillämpning inom vattenförvaltning i enskilt medlemsland

<sup>3</sup> Det är "stora boxar", mycket specifik in-data krävs och manual saknas. Verktöget har bl.a. använts inom COHIBA projektet av SYKE.

<sup>4</sup> Inga manualer finns, bara forskningsartiklar och ingen support.

<sup>5</sup> Moira är egentligen ett forskningsprojekt och ingen modell, men ett par modeller har tagits fram inom projektet. Med kunskaper i programmering kan det vara möjligt att ta fram en egen modell utifrån t.ex. Monte et al (1999).

Under den första förvaltningscykeln gjordes olika ansatser i flera län att försöka identifiera för vilka vattenförekomster det förelåg en risk för att status inte var god. Ett exempel är t.ex. analys i ArcGIS i kombination med poängsättning av olika typer av påverkanstryck, här kallad ”länens GIS-analys”. Angreppssättet användes i Värmland och Västra Götaland och sedan efter viss modifikation i Norra och Södra Östersjöns vattendistrikt. Inför den andra förvaltningscykeln utvecklades den s.k. ”miljögiftsmodellen”, av IVL och SMHI på uppdrag av vattenmyndigheterna. Modelleringsberäkningarna baserades på utspädning men resultaten har bedömts som osäkra. Schablondata som har sammanställts inom ramen för projektet kan dock i sig vara användbara som stöd om uppgifter saknas i det enskilda fallet (Ejhed et al 2013). Båda dessa verktyg beskrivs ytterligare i bilagan.

I tabell 1 finns några modeller som främst har utvecklats för att uppskatta belastning från vissa typer av källor och som är anpassade till förhållandena i ett enskilt land. Hit hör SAGIS (från Storbritannien), MoRE (från Tyskland) samt wPOLIS och wPRISMA (från Grekland). Dessa beskrivs också mer utförligt i bilagan.

## Tillämpning inom kemikalielagstiftning

En modell som främst används för storskaliga bedömningar i samband med europeisk kemikalieriskbedömning är EUSES. Den används för att uppskatta PEC (Predicted Environmental Concentration) på olika skala (för olika scenarier) och beskrivs närmre i bilagan. Notera att SIMPLE-BOX (nämns ovan) ingår som en del i EUSES.

Även MACRO används för motsvarande beräkningar fast för växtskyddsmedel. I detta sammanhang används även andra typer av verktyg för att t.ex. uppskatta ett ämnes inneboende egenskaper såsom nedbrytbarhet och toxicitet men det har inte ingått i uppdraget att inventera även dessa.

## Under utveckling

SMHI har utvecklat NET-modellen. I dagsläget kan modellen bara köras av SMHI men man hoppas kunna ta fram ett web-baserat gränssnitt. Modellen kan, eventuellt efter viss utveckling, vara användbar som stöd vid ”källspårning/källfördelning” uppströms och uppskattning av metalltransport (belastning) nedströms. Den beskrivs mer utförligt i bilagan.

Även ”Base Flow Index” (alt Fast Flow Index, FFI) är under utveckling av SLU och beskrivs inte ytterligare i denna rapport.

## Förorenad mark

Riktvärdesmodellen är en markmodell även om den också kan ge en mycket grov uppskattning av halter i vatten. Den beskrivs ytterligare i bilagan. Även CalTox<sup>6</sup> utvecklades för riskbedömning avseende human hälsa, för förorenad mark. CalTox är en äldre modell och det är oklart vilka processer som ingår. Den beskrivs inte ytterligare i denna rapport.

---

<sup>6</sup>Se t.ex. [http://dtsc.ca.gov/AssessingRisk/ctox\\_model.cfm](http://dtsc.ca.gov/AssessingRisk/ctox_model.cfm)  
[http://dtsc.ca.gov/AssessingRisk/ctox\\_dwn.cfm](http://dtsc.ca.gov/AssessingRisk/ctox_dwn.cfm)

## Plymer

MARMAK och CORMIX kan användas för att uppskatta utbredningen hos plymer. CORMIX är en kommersiell modell och används för att uppskatta det initiala påverkansområdet dvs. hur plymen breder ut sig och späds i tid och rum (3D). MARMAK är en förenklad spridningsmodell för plymer. Båda verktygen beskrivs ytterligare i bilagan.

## Spill

CHEMMAP är en dynamisk modell med fokus på kemikaliespill (organiska och oorganiska ämnen) från havsbaserade transporter, för att prediktera spridningen och biologiska effekter i marin miljö. Processer som beaktas är t.ex. slickspridning, transport och hur flytande material rör sig, avdunstning, bindning till sediment och resuspension, biologisk nedbrytning och spridning till stränder. Verktöget är kommersiellt. CHEMMAP beskrivs inte ytterligare i den här rapporten.

## Dagvatten

STORMTAC används frekvent av svenska kommuner för att uppskatta behov av dagvattenrening på en specifik plats. Den kan därför vara användbar för att uppskatta betydelsen av dagvattentillförsel lokalt och beskrivs ytterligare i bilagan.

## Spridningsmodeller för luft

Inventeringen ovan var fokuserad på verktyg som är tillgängliga för modellering av akvatiska system. Utsläpp av t.ex. persistenta ämnen till luft kan ha stor betydelse även för ytvattenmiljön, genom indirekt tillförsel. Nedan ges därför två exempel på verktyg, TAPM och ADMS, som ofta har använts för lokala och regionala bedömningar (beräkning av spridning och deposition till följd av utsläpp från t.ex. skorsten). Beskrivningarna har i det här fallet tagits fram av IVL.

TAPM och ADMS används båda för att uppskatta depositionen på mark och markvatten, från punktutsläpp till luft och kan användas för att uppskatta deposition även över vattenytor. Skillnader mellan olika luftspridningsmodeller är bl.a. hur väl nederbördens geografiska variation kan beräknas.

Modelleringsverktyg för spridning i luft används också frekvent för att uppskatta mer storskalig spridning (t.ex. över hela Europa eller globalt) och belastning från långväga atmosfärstransporter av semivolatila persistenta luftföroreningar och kvicksilver (se t.ex. EMEP, 2016). Den geografiska upplösningen hos modellerade resultat blir lägre men på så sätt kan man uppskatta hur mycket som deponeras av olika ämnen och från olika källor.

## Referenser

**Boström G, Gönczi M, Kreuger J. 2014.** Kemiska bekämpningsmedel i Skånes ytvatten 1983–2014. Med jämförelser mot den nationella miljöövervakningen. CKBs rapport 2014:2 och Havs- och vattenmyndighetens rapport 2014:2

[https://www.slu.se/globalassets/ew/org/centrb/ckb/publikationer/ckb-rapporter/rapport--kemiska-bekampningsmedel-i-skanes-ytvatten\\_141008\\_slutgiltig.pdf](https://www.slu.se/globalassets/ew/org/centrb/ckb/publikationer/ckb-rapporter/rapport--kemiska-bekampningsmedel-i-skanes-ytvatten_141008_slutgiltig.pdf)

- Boström G. 2014.** Riskkartering av bekämpningsmedel i skånska ytvatten. Länsstyrelsen i Skåne län. Rapport 2014:5.  
[http://www.lansstyrelsen.se/skane/SiteCollectionDocuments/Sv/publikationer/2014/Riskkartering\\_bekampningsmede\\_skanska\\_ytvatten.pdf](http://www.lansstyrelsen.se/skane/SiteCollectionDocuments/Sv/publikationer/2014/Riskkartering_bekampningsmede_skanska_ytvatten.pdf)
- Boström G, Moeys J, Jarvis N, Gönczi M, Kreuger J. 2015.** Riskkartering av bekämpningsmedel i Skånes grundvatten. Simuleringar med MACRO-SE. CKB rapport 2015:1.  
[https://pub.epsilon.slu.se/12296/7/bostrom\\_g\\_et al\\_150630.pdf](https://pub.epsilon.slu.se/12296/7/bostrom_g_et al_150630.pdf)
- Chen D., Wang T., Haeger-Eugensson M., Aschberger C., and Borne K. 2002.** Application of TAPM in Swedish West Coast: Modelling results and their validation during 1999–2000. IVL report: L 2.
- Comber SDW, Smith R, Daldorph PWG, Gardner MJ, Constantino C, Ellor B. 2013.** Development of a Chemical Source Apportionment Decision Support Framework for Catchment Management. Environ. Sci. Technol., 2013, 47 (17), pp 9824–9832
- Ejhed H, Palm Cousins A, Andersson H, Wallberg P och K Hansson. 2013.** Utveckling av påverkansanalysmodell miljögifter. Schablonhalter för utsläpp från diffusa källor samt utveckling av mark- och sedimentmodul till påverkansanalysmodellen. IVL rapport B 2125.
- EMEP 2016.** Assessment of Heavy Metal Transboundary Pollution, Progress in Model Development and Mercury Research. Status report 2/2016.
- Fuchs, S.; Kaiser, M.; Kiemle, L.; Kittlaus, S.; Rothvoß, S.; Toshovski, S.; Wagner, A.; Wander, R.; Weber, T.; Ziegler, S. 2017.** Modeling of Regionalized Emissions.  
<http://www.mdpi.com/2073-4441/9/4/239>
- Furberg, A. 2014.** Environmental Risk Assessment of Pharmaceutical Exposure to Fish in the Swedish Göta Älv River. Examensarbete inom civilingenjörsprogrammet kemiteknik med fysik. Department of Energy and Environment. Division of Environmental System Analysis. CHALMERS UNIVERSITY OF TECHNOLOGY, Göteborg, Sweden 2014 Report no. 2014:9
- Haeger-Eugensson M, Persson K, Hellsten S. 2008.** Spridnings- och depositionsberäkningar för Rönnskärsverken. IVL rapport U-2323.
- Hetes RG, Langstaff JE. 2000.** Estimation of uncertainty and variability within the total risk integrated methodology (TRIM). 21st Annual Meeting of the Society of Environmental Toxicology and Chemistry. 12-16 November, 2000. Nashville, TN.
- Hållén J. 2016.** PCB i Oxundasjön och Rosersbergsviken: Prediktiv modellering av återhämtningsscenarier. Examensarbete vid Uppsala universitet, institutionen för ekologi och genetik.
- Karlsson, M., Malmaeus, M., Josefsson, S., Wiberg, K. & Håkanson, L. 2010.** Application of a mass-balance model to predict PCDD/F turnover in a Baltic coastal estuary. Estuarine, Coastal and Shelf Science, 88(2), 209-218.
- Larsbo M, Roulier S, Stenemo F, Kasteel R, Jarvis N. 2005.** An improved dual-permeability model of water flow and solute transport in the vadose zone. Vadose Zone Journal 4, 2: 398-406.

- Mackay, D., Joy, M., Paterson, S. 1983a.** A Quantitative Water, Air, Sediment Interaction (QWASI) Fugacity Model for Describing The Fate of Chemicals in Lakes. *Chemosphere*. 12: 981-997.
- Mackay, D., Paterson, S., Joy, M. 1983b.** A Quantitative Water, Air, Sediment Interaction (QWASI) Fugacity Model for Describing the Fate of Chemicals in Rivers. *Chemosphere*. 12: 1193-1208.
- Mackay, D. 1989.** Modelling the Long Term Behaviour of an Organic Contaminant in a Large Lake: Application to PCBs in Lake Ontario. *J. Great Lakes Res.* 15: 283-297
- Mackay, D. 2001.** "Multimedia Environmental Models: The Fugacity Approach - Second edition", Lewis Publishers, Boca Raton. pp. 201-213.
- Monte L, Brittain JL, Håkansson L, Díaz LG. 1999.** Moira models and methodologies for assessing the effectiveness of countermeasures in complex aquatic systems contaminated by radionuclides. MOIRA – Project no. FI4P-CT96-0036 European Commission, RT/AMB/99/1.  
<http://www.iaea.org/inis/collection/NCLCollectionStore/Public/31/043/31043094.pdf>
- Murphy DL, Maddalena R, Langstaff J, Jones B, Lee RM, Eyth A, Lyon BF, McVey M and Laniak G. 2002.** Evaluation of the TRIM.FaTE multi-media model - A mercury case study. Joint Meeting of the International Societies of Exposure Assessment and Environmental Epidemiology. 12-16 August, 2002. Vancouver, Canada
- Naturvårdsverket. 2009.** Riktvärden för förorenad mark. Modellbeskrivning och vägledning. Rapport 5976. <https://www.naturvardsverket.se/Documents/publikationer/978-91-620-5976-7.pdf?pid=3574>
- Pun, B K. Wu S-Y and Seigneur C. 2002.** Contribution of Biogenic Emissions to the Formation of Ozone and Particulate Matter in the Eastern United States. *Environ. Sci. Technol.*, 36 (16), 3586 -3596, 2002.
- Schoorl M, Hollander A, van de Meent D. 2016.** SimpleBox 4.0. A multimedia mass balance model for evaluating the fate of chemical substances. RIVM Report 2015-0161
- Steffens K, Jarvis N, Lewan E, Lindström B, Kreuger J, Kjellström E, Moeys J. 2015.** Direct and indirect effects of climate change on herbicide leaching – A regional scale assessment in Sweden. *Science of The Total Environment*, Volume 514, 1 May 2015, Pages 239-249.  
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969714017513>
- Tang, L., Miao, J.-F., & Chen, D. 2009.** Performance of TAPM against MM5 at urban scale during GÖTE2001 campaign. *Boreal Environment Research* 14(2), 338-350.
- Webster E, Lian L, Mackay D, Harvey C. 2006.** Application of the Quantitative Water Air Sediment Interaction (QWASI) Model to the Great Lakes. Report to Ontario Ministry of the Environment. Canadian Environmental Modelling Centre, Trent University. CEMC Report No. 200501. <https://www.trentu.ca/academic/aminss/envmodel/CEMC200501.pdf>
- Wängberg I, Barregård L, Sällsten G, Haeger-Eugensson M, Munthe J, Sommar J. 2005.** Emissions, dispersion and human exposure of mercury from a Swedish chlor-alkali plant. *Atmospheric Environment* 39 (2005) 7451–7458.



**Zhang L, Cao Y, Hao X, Zhang Y, Liu J. 2015.** Application of the GREAT-ER model for environmental risk assessment of nonylphenol and nonylphenol ethoxylates in China. *Environ Sci Pollut Res* (2015) 22:18531–18540.

# Bilaga

## Modeller för akvatisk miljö

Beskrivningarna nedan bygger i stort sett helt på underlag från DHI men har i vissa fall kompletterats genom kontakt med t.ex. utvecklare eller sökning på hemsidor. Modellerna har ordnats i bokstavsordning.

### AQUATOX

För dokumentation, kontakt och manual, se hemsida<sup>7</sup>. Modellen är fritt tillgänglig och lätt att använda. AQUATOX predikterar spridning för många olika typer av föroreningar, på lokal respektive regional nivå, till vatten, sediment och biota. Det är en dynamisk, deterministisk boxmodell. Det behövs relativt mycket indata och modellen blir relativt komplex men verktyget har inbyggda databaser för både ämnen, recipient och biota. Det finns en "guide" som hjälper till med att sätta upp en specifik beräkning för lokalspecifika förhållanden.

Processer som ingår är biologisk och abiotisk nedbrytning (inklusive hydrolys och fotolys), adsorption/desorption (både dynamisk och jämviktsbaserad), avdunstning och advektion, sedimentation och resuspension samt speciering. Verktyget är framtaget för att uppskatta medelvärden över en dag eller timme vid god omblandning (vid stratifiering, omblandning inom respektive skikt), men simuleringar för flera år går att göra. Sjöar antas ha två skikt – epi- respektive hypolimnion. Upp till 10 sedimentskikt kan modelleras. Följande biotakomponenter ingår: akvatiska kräftdjur, insektslarver, mollusker, fisk (med olika födosätt), alger, makrofyter. Samtliga ämnen kan modelleras, även om verktyget från början främst utvecklats för pesticider. Särskild PFOS/PFOA modul finns. Osäkerhetsanalys kan köras och ett flertal tillämpningar har publicerats<sup>8</sup>.

Verktyget kan också användas för att uppskatta biologiska konsekvenser och vilka stressorer som ligger bakom en observerad effekt liksom potentiell respons på klimatförändringar eller förändrad markanvändning (genom koppling till "BASINS"). Slutligen kan även tid till återgång till "säkra nivåer" hos ämnen i biota efter det att tillförseln har upphört uppskattas.

### CORMIX

CORMIX<sup>9</sup> är en deterministisk fugacitetsbaserad steady-state modell som används för att beräkna den initiala utspädningen (i 3D) från en utsläppspunkt i omgivande vatten, minut för minut. Utsläppet kan ha positiv (plym) eller negativ (bottenström) flytkraft. Modellen kan räkna ut om utsläppet så småningom lagras in sig i vattenkolumnen och i så fall på vilken nivå.

<sup>7</sup> <https://www.epa.gov/exposure-assessment-models/aquatox> Manual: <https://www.epa.gov/exposure-assessment-models/aquatox-supporting-documents>

<sup>8</sup> Se publikationslista: <https://www.epa.gov/exposure-assessment-models/selected-publications-aquatox>

<sup>9</sup> <http://www.cormix.info/>

Omgivande vattens densitetsskiktning kan tas med samt omgivande ström- och vindförhållanden. Geometrin är något förenklad men ger en bild av plymens utveckling så länge dess momentum är högre än omgivningens. Verktøget fungerar för alla typer av vatten (sjö, vattendrag, öppet hav och kust) och ämnen. Inga processer ingår utöver omblandning men modellen beaktar även bottentopografin.

## **EUSES**

Manual finns<sup>10</sup>, modellen är fritt tillgänglig och lätt att använda. Modellen används på EU-nivå för att uppskatta PEC (Predicted Environmental Concentration) för riskbedömningar av kemikalier och aktiva substanser i biocider<sup>11</sup>.

Flera olika scenarier (nationellt, regionalt, lokalt) är redan inbyggda i verktøget. PEC beräknas genom att lokal koncentration adderas till "bakgrunden" som i sin tur räknas fram som en jämviktskoncentration där alla utsläpp i regionen beaktas. Denna siffra brukar ofta anges som 10% av alla utsläpp till EU. För lokalt scenario är defaultvärden redan inbyggda (10 gångers spädning för sötvatten och 100 gångers spädning för marina vatten). Flera verifieringsstudier har gjorts.

Kust, sjö och vattendrag kan modelleras men inte öppet hav. Biologisk och abiotisk nedbrytning beaktas, liksom adsorption/desorption och advektion och avdunstning, men inte sedimentation eller speciering. EUSES utvecklades för organiska ämnen men separat verktøg för metaller<sup>12</sup> och oljekomponenter har tagits fram.

## **GEMCO**

GEMCO (Generic Estuary Modelling of Contaminants) utvecklades av Deltares på uppdrag av CEFIC<sup>13</sup>. Verktøget ska kunna användas av icke-specialister och är fritt tillgängligt via kontakt med utvecklarna<sup>14</sup>. GEMCO är tillämpbar för estuarier och angränsande marina vatten. Användbar för vatten, sediment och biota (även näringsväv). Många processer (biologisk och abiotisk nedbrytning, adsorption/desorption vid antagande om jämvikt; avdunstning, advektion, sedimentation och resuspension) beaktas men inte ämnens speciering. Verktøget fungerar bäst för organiska ämnen. Näringsvävsmodellen har verifierats med holländska data (PCB, PAH och HCB i musslor) från Scheldt, Ems och Seine med relativt eller väldigt bra överensstämmelse mellan predikterade halter och uppmätta.

<sup>10</sup> [http://ecb.jrc.ec.europa.eu/documents/Existing-Chemicals/EUSES/EUSES\\_2.1/EUSES\\_2.1\\_documentation/EUSES\\_2.1\\_User\\_Manual.pdf](http://ecb.jrc.ec.europa.eu/documents/Existing-Chemicals/EUSES/EUSES_2.1/EUSES_2.1_documentation/EUSES_2.1_User_Manual.pdf)

<sup>11</sup> <http://www.pbl.nl/sites/default/files/cms/publicaties/601900005.pdf>

<sup>12</sup> "EUSES for metals" kan erhållas från <http://www.arche-consulting.be/Metal-CSA-toolbox/du-scaling-tool>. CONCAWE har utvecklat separat version för olja.

<sup>13</sup> <http://cefic-iri.org/wp-content/uploads/2014/03/gemco-finalreport.pdf>

<sup>14</sup> <https://www.deltares.nl/en/software-solutions/>

## GREAT-ER

GREAT-ER (Geo-referenced Regional environmental Exposure Assessment Tool for European Rivers) är fritt tillgängligt för de som jobbar med forskning, riskbedömning, förvaltning eller undervisning. Modelleringsexpertis kan dock behövas<sup>15</sup>. GREAT-ER är en web-baserad box-modell med stokastiskt angreppssätt. Modellen har utvecklats för att kunna uppskatta halter i vatten vid utsläpp från en eller flera punkter, såsom industriutsläpp eller reningsverk. Resultaten levereras i form av koncentrationsfördelningen för delar av en vattendragssträcka och för respektive utsläppspunkt. Verktøget kan vara användbart för att uppskatta koncentrationer i vatten i ett vattendrag vid utsläpp från punktkällor såsom avloppsreningsverk. En tänkbar avsedd användning är inom vattenförvaltning och riskbedömning av kemikalier. Modellen kombinerar GIS med "fate modellering" och visualiserar uppskattad koncentration längs ett vattendrag. Man kan även koppla ihop modellen med en annan modell, TERRACE (Terrestrial Runoff Modelling for Risk Assessment of Chemical Exposure), för att kunna modellera diffus tillförsel; denna har dock inte granskats inom ramen för uppdraget.

Modellen beaktar biologisk och abiotisk nedbrytning, adsorption/desorption, avdunstning, advektion, speciering och sedimentation. GREAT-ER har i Sverige använts för att modellera halter av läkemedel i Göta Älv (Furberg, 2014). Internationellt har det t.ex. använts för att modellera nonylfenoler och nonylfenoletoxilater (Zhang et al 2015).

Modellen har utvärderats mot övervakningsdata (gäller GREAT-ER 1.0) från ett 2-årigt övervakningsprogram i Storbritannien (Yorkshire), Italien (Lambro) och Tyskland (Itter), med över 2000 vattendragsprover och över 600 avloppsvattenprover och för ämnet LAS och bor.

## INCA

INCA är en grupp modellverktyg på avrinningsområdesnivå. De har ett relativt lättanvänt grafiskt gränssnitt och ingen särskild programvara krävs. Modellverktygen har utvecklats kontinuerligt under lång tid, är väl använda internationellt och har även använts i Sverige. Modellen kan erhållas genom kontakt med universitetet i Reading och via hemsidan får man mer information om t.ex. resultaten från olika fallstudier<sup>16</sup>. Modellerna togs fram för att prediktera vattenkvalitetsrelaterade parametrar såsom näringsämnen men även kvicksilver ("INCA-Mercury") och andra metaller ("INCA-Metals"; omfattar As, Pb, Cd, Cu, Ni, Cr, Mg, Mb) och organiska miljögifter.

Modellen är dynamisk. Variationer från dag för dag i t ex flöden och vattenkvalitet kan undersökas till följd av förändrad belastning av både punktkällor och källor av diffus karaktär såsom atmosfärsdeposition eller gödsling. Tidsupplösningen är ett dygn och modellen beaktar olika processer i jord och ytvatten (bl.a. utspädning, biologisk nedbrytning och speciering). Den

<sup>15</sup> Den mest aktuella versionen som är publikt tillgänglig just nu är GREAT-ER 3.0 desktop (2011), för Microsoft Windows XP och 7. Hela systemet är baserat på "open source programvara". Den allra senaste versionen (GREAT-ER 4.0) är ännu ej publik men testversion går att få tillgång till men kräver ytterligare programvara och för att lägga till ytterligare avrinningsområden behöver erfarna modellerare anlitas.

<sup>16</sup><http://www.reading.ac.uk/geographyandenvironmentalscience/research/inca/ges-inca-methods.aspx>  
<http://www.reading.ac.uk/geographyandenvironmentalscience/research/INCA/ges-INCA-case-studies.aspx>  
<http://www.reading.ac.uk/geographyandenvironmentalscience/research/INCA/ges-INCA-versions-applications.aspx>

kan kalibreras mot vattenkvalitetsdata och man kan simulera långa tidsperioder (år till århundraden) vilket möjliggör framtagande av relativt högupplösta långsiktiga prognoser.

Modellen har bl.a. använts för att modellera kvicksilver (Gårdsjön), punkt- och diffusa källor i urbana avrinningsområden, metaller nedströms en gruva mm.

## ”Länens GIS analys”

Under första förvaltningscykeln användes en analys i ArcGIS i kombination med poängsättning (viktning) av olika typer av påverkanstryck, såsom markanvändning<sup>17</sup> för att identifiera för vilka vattenförekomster det förelåg en risk för att status inte var god. Någon verifiering har inte gjorts i egentlig mening men den pekar ut "kända problemområden" men inte sådana som kan antas vara opåverkade. Man behöver ha tillgång till data från EBH stödet och SMP samt GIS-skikt för olika typer av markanvändning: jordbruk, hårdgjord yta, transport, enskilda avlopp. En slutsats som drogs var att det inte är nödvändigt att räkna fram en "totalsumma". Utifrån riskpoängen avseende ett visst påverkanstryck kan man istället uppskatta vilka ämnesgrupper som kan tänkas vara problematiska i en viss vattenförekomst. Höga riskpoäng för t.ex. transport indikerar att det kan föreligga risk för PAH och metaller. Vilka viktningspoäng som har använts för respektive påverkanstryck framgår av referensdokumentet och är till viss del (för t.ex. transport och förorenade områden) samma som de som tillämpades vid länens påverkansanalys för grundvatten.

## MACRO-SE

Modellen är skriven i ”R”. MACRO-SE behöver köras av modelleringsexpertis. Dynamisk modell som beräknar läckage av kemiska växtskyddsmedel från jordbruksmark till grund- och ytvatten (se t.ex. Larsbo et al (2005)). Vertyget är framtaget för att modellera bekämpningsmedelsanvändning inom jordbruk och trädodlingar på naturlig mark (åker) men inte för skog eller t.ex. handelsträdgårdar.

Markprocesser som ingår: ämnestransport (advektion och dispersion), linjär och icke linjär adsorption. Halter i dräningsrören (”edge of field”) uppskattas primärt. Därefter beaktas spädningen i recipienten (genom inkoppling av S-HYPE) och halter i utlopp från avrinningsområdet beräknas. Förutom spädning (kopplad till S-HYPE) ingår inga andra processer som beskriver ödet i recipienten ytvatten (t.ex. partikelbindning och fotolys).

Som transportväg beaktas bara tillförsel via dräneringsrör, vilket oftast är den viktigaste transportvägen. Men även vindavdrift, avrinning eller partikelbunden transport kan vara viktiga transportvägar lokalt. Några andra osäkerheter som har identifierats är lokala variationer i

---

17

<http://viss.lansstyrelsen.se/ReferenceLibrary/50831/Metod%20beskrivning%20Paverkansanalys%20SÖ%20och%20NÖ.pdf>

upptag av grödan och jordförhållanden. Modellen utgår ifrån normal användning av bekämpningsmedlet och tar ej hänsyn till olyckor och spill<sup>18</sup>.

”Macro” används för riskbedömning vid registrering av nya växtskyddsmedelsprodukter. I dessa situationer utgår man från ”rimliga värsta-falls-antaganden”. Både Macro-SE och Macro-DB bygger på samma grundmodell (Macro) men SE-versionen avser en mer regional skala (t.ex. Skåne) medan DB är mer lokal och platsspecifik för exempelvis bedömningar vid användning inom ett vattenskyddsområde. Macro DB används därför ofta för tillståndsprövningar på lokal skala och kan användas även inför inrättande av vattenskyddsområde.

MACRO SE har verifierats mot mätdata och generellt hamnar predikterade halter inom samma storleksordning som övervakningsdata. Macro-modellen har även använts för att bedöma inverkan av klimatförändringar (Steffens et al 2015). Andra referenser till rapporter som beskriver tillämpning av modellen: Boström et al 2014; Boström, 2014; Boström et al 2015.

## MARMAK

MARMAK<sup>19</sup> är en spridningsmodell för plymer av t.ex. avlopps- och kylvatten. Det är en förenklad modell (mindre avancerad än CORMIX) jämfört med en hydrodynamisk modell (t.ex. tar den inte hänsyn till djup och bottenpografi). Den är relativt enkel att använda då främst i ett första steg för att avgöra om noggrannare utredning behövs.

Den enda process som ingår är advektion och därför krävs inte så mycket indata (temperatur och densitet, djup, bredd, flöde och strömhastighet). MARMAK har använts frekvent i tillståndsutredningar för att uppskatta det initiala påverkansområdet på en övergripande nivå och har verifierats.

## MIKE + ECO-LAB

MIKE är en hydrodynamisk modell som finns i ett flertal varianter, MIKE 11, MIKE 21 och MIKE 3D. Med endast MIKE kan man göra enkel spridningsmodellering (advektion -dispersion) av konservativa, vattenlösliga ämnen eller konservativa, ej vattenlösliga ämnen (partikelspridning). Används för spridningsberäkningar vid t ex tillståndsprocesser i Sverige, främst näringsämnen men har även använts av kemisk industri för att bedöma påverkan vid större utsläpp/olyckor.

Till den hydrodynamiska modellen kan kopplas en ekvationslösare för kemisk/ekologisk modellering, ECOlab, som då bl a används för fate-modellering av olika substanser. Tillsammans får man ett verktyg som simulerar både transport och "fate" för substanserna. Modellen kan uppskatta halter i alla matriser (vatten, sediment och biota) och användas för kust, hav, sjö och vattendrag samt olika geografisk skala (från europeisk ner till lokal nivå).

Alla ämnen med kända egenskaper kan modelleras och det är även möjligt att modellera sedimentspridning. Biologisk och abiotisk nedbrytning (fotolys och hydrolysis) ingår, liksom

<sup>18</sup> De flesta bekämpningsmedel som godkänns idag bryts ned fort i mark. Men en del av substanserna hamnar i vatten direkt trots att de inte ska och nedbrytning i vatten kan vara långsammare.

<sup>19</sup> <http://www.ivl.se/download/18.343dc99d14e8bb0f58b7649/1454339607018/B2080.pdf>

advektion, avdunstning, speciering, adsorption/desorption och sedimentation. Ett ECOLab verktyg för tungmetaller har också utvecklats där resuspension också ingår förutom sedimentation och upptag i biota. Har använts bl.a. inom COHIBA projektet (WP 4 Sources and flows<sup>20</sup>). Osäkerheten hos hydrologiska data kan analyseras (gör ofta genom verifiering mot uppmätta hydrologiska data innan varje simulering).

### ”Miljögiftsmodellen”

”Miljögiftsmodellen” utvecklades av IVL och SMHI och på uppdrag av vattenmyndigheterna med syfte att ligga till grund för påverkansanalys inom vattenförvaltningen under den andra förvaltningscykeln. Utsläppsmängder multiplicerades med en retentionskoefficient framtagen av IVL och mängderna härifrån matades in i SMHIs S-HYPE för att räkna ut koncentrationer i vatten av de olika modellerade ämnena. Utsläppsmängderna uppskattades av vattenmyndigheterna och byggde på markanvändning (dagvattenschabloner från Stormtac multiplicerat med ytan i delavrinningsområdet), utsläppsdata från SMP, medelvärdesschabloner för förorenad mark, båttrafik etc.

Modellen tar inte hänsyn till geologiska förutsättningar eller avstånd till vatten för de utsläppspunkter som beräknades per delavrinningsområde utan till de punkter som låg direkt intill vatten eller helt på land. Det är svårt att justera indata mellan beräkningarna eftersom något användarvänligt gränssnitt aldrig togs fram.

### MoRE

MoRE utvecklades för att på årsbasis uppskatta belastning på avrinningsområdesnivå och för vattendrag i Tyskland, se t.ex. Fuchs et al (2017). Resultaten används som underlag för Tysklands inrapportering av register för utsläpp och spill. Årliga emissioner modelleras för näringsämnen, tungmetaller och organiska miljögifter såsom PAH, DEHP och vissa läkemedel. Olika typer av källor ingår såsom atmosfärsdeposition, erosion, ytavrinning, grundvatten, direktutsläpp och nedlagda gruvområden.

### NET modellen

NET är en statisk steady-state modell som utvecklades inom projektet CLEO<sup>21</sup> för att utifrån kunskap om de hydrologiska nätverken (hur sjöar och vattendrag är sammankopplade) kunna bedöma hur vattenburna ämnen sprids. NET uppskattar markläckage från enskilda marktyper (jordbruksmark, skogsmark, mosse/kärr, kalfjäll/tunna jordar, urbant och övrig mark) samt sjöar och beräknar den viktade medelhalten (snarare än dagliga halter) i bidraget från varje lokalt beräkningsområde. Hydrologisk information och markanvändningsdata hämtas från S-HYPE.

<sup>20</sup> Hydrodynamic fate modelling of hazardous substances in Copenhagen Harbour. Modelling of discharges from land based point sources [http://www.cohiba-project.net/publications/en\\_GB/publications/files/87554286518208223/default/WP4DKFinalReport\\_31012012.pdf](http://www.cohiba-project.net/publications/en_GB/publications/files/87554286518208223/default/WP4DKFinalReport_31012012.pdf)

<sup>21</sup> [www.smhi.se/professionella-tjanster/professionella-tjanster/vattenmiljo/net-analysverktyg-for-amnestransport-i-hydrologiska-natverk-1.103082](http://www.smhi.se/professionella-tjanster/professionella-tjanster/vattenmiljo/net-analysverktyg-for-amnestransport-i-hydrologiska-natverk-1.103082)

Därutöver läggs retentionsprocesser till för respektive ämne – men som kan vara beroende av vattnets teoretiska omsättningstid och kan kalibreras med hjälp av mätdata.

Den befinner sig i utvecklingsstadiet<sup>22</sup> och än så länge ser man relativt låg korrelation mellan predikerade halter och uppmätta halter av metaller. Tanken är dock att NET ska vara generell, dvs kunna användas för simulering av olika ämnen, men endast beräkna medelvärden över tiden av mängder och koncentrationer. Inga processer ingår utan verktygets simuleringar beaktar medelvattenföring och flödesviktade halter vid normalväder. Modellen tar i dagsläget inte hänsyn till ämnens kemiska egenskaper och man kan t.ex. inte skilja löst halt från total halt. Tänkt användningsområden är bl.a. för att uppskatta nedströms transporter (mängder) utifrån kännedom om tillförda mängder eller tvärtom för att utgå från uppmätta halter och uppskatta ungefär var källor befinner sig uppströms. I det sistnämnda fallet kan källfördelningen beräknas sektorsvis, t.ex. för att skilja mellan punktkällor och diffusa källor. Fördelningen baseras på data om vattenflöden och omsättningstider i olika områden samt ämnesspecifik retention.

## QWASI

QWASI (Quantitative Water Air Sediment Interaction) har utvecklats av Trent university se t.ex. Mackay (2001), Mackay et al (1983a , 1983b) och Mackay 1989 för exempel på tillämpningar. Modellen är enkel att använda och en excel-version håller på att tas fram<sup>23</sup>. Det är en deterministisk fugacitetsmodell som predikerar fördelningen mellan sediment, luft och vatten av ett enskilt organiskt ämne i en sjö vid ”steady state”. Man kan med modellen beakta olika typ av tillförsel såsom direktutsläpp, inflöde från vattendrag och atmosfärsdeposition. Modellen kan även anpassas för fjordar och vattendrag.

QWASI beaktar organiska ämnens biologiska och abiotiska nedbrytning i vattenkolumnen, adsorption, desorption, advektion och flyktighet (avdunstning), sedimentation och resuspension och utflöde med vattendrag. Modellen kan inte användas för att t.ex. uppskatta om särskilda utsläppsförhållanden leder till koncentrationstoppar utan det är mer långsiktiga förlopp som avses att modelleras. Det är ett relativt stort antal indata som krävs för att beskriva den lokala recipienten men många kan uppskattas. Valda värden för några tidigare modelleringstillämpningar framgår av Webster et al 2006. Två access-databaser är inbyggda i verktyget. En avser substansegenskaper, en avser miljödata.

QWASI kan inte användas för att uppskatta vilka halter som inlagras i biota, men på samma hemsida finns en modell som går att tillämpa för att uppskatta flöden av miljögifter genom en näringsväv (med högst 9 organismer), Foodweb model (detta verktyg har dock inte granskats inom ramen för uppdraget men en excel-version är på gång även här).

<sup>22</sup> Utkast till SMHI rapport finns här: [http://www.smhi.se/polopoly\\_fs/1.115939!/NET-Rapport%20%284%29.pdf](http://www.smhi.se/polopoly_fs/1.115939!/NET-Rapport%20%284%29.pdf)

<sup>23</sup> Verktyget (för närvarande version 3.10) kan laddas ner här: <http://people.trentu.ca/~mparnis/Models.html> Man behöver tänka på att ändra inställningarna i datorn så att man utgår från punkt och inte komma som decimaltecken.



## Riktvärdesmodellen

Riktvärdesmodellen är en fugacitetsbaserad modell i excel för att räkna fram platsspecifika riktvärden för förorenad mark och utvecklades av SGI/Naturvårdsverket (Naturvårdsverket, 2009).

Verktyget kan utifrån föroreningshalt i jord även göra mycket grova uppskattningar av halter i kontaktmedier som ytvatten (vattendrag eller sjö) men inte sediment. Verktyget kan även användas för mycket förenklade beräkningar av upptag i fisk. Fetthalt i fisk uppskattas då till 5 %. Alla beräkningar, schabloner och koefficienter framgår tydligt av handboken.

Ett sextiotal ämnen ingår. För markberäkningar ingår flera processer men för vatten beaktas bara spädning, och denna beräknas enligt flöde från porvatten till grundvatten till ytrecipient. Ingen nedbrytning, förångning eller sedimentation beaktas. Utspädningsfaktorn mellan markpor- och ytvatten är 1/4000 (modellen antar att recipienten är en sjö som är 1 miljon m<sup>3</sup> med omsättning på ett år eller vattendrag med 1 miljon m<sup>3</sup>/år dvs 30 l/s; motsvarar ett 3-6 km<sup>2</sup> stort avrinningsområde; detta kan dock ändras).

Modellen antar vattenflöde året om och att utlakningen är proportionell mot halten i fast material och konstant i tiden. Beräkningen utgår från att en fullständig omblandning sker i recipienten.

Absorption och dispersion ingår inte och ingen hänsyn tas till olika KD värden. Helt homogen transport i poröst medium antas. Platsspecifik uppskattning av utspädningsfaktorer behövs. Modellen är ej tillämpbar för system med höga flöden.

## SAGIS

SAGIS (The Source Apportionment-GIS (SAGIS) är en kommersiell steady state modell utvecklad i Storbritannien<sup>24</sup>, se t.ex. Comber et al (2013). Främsta syftet var att utveckla ett modellramverk för robusta uppskattningar av olika källors bidrag (belastning) från 12 punkt och diffusa källtyper (avloppsvatten, jordbruk, jorderosion, gruvor, industrier etc). Belastningen räknas om till koncentrationer i vattendrag genom användning av SIMulation of CATchments (SIMCAT) water quality model. Denna är inbyggd i SAGIS. På så vis kan man även få en uppskattning av vilken andel som kommer från en specifik källa. Diffusa källor och näringstillförsel ingår också via Phosphorus and Sediment Yield Characterisation In Catchments (PSYCHIC) modellen.

SAGIS fungerar för sjöar och vattendrag men inte kust eller hav. Man kan modellera ett 20-tal ämnen, inklusive metaller, PAH och DEHP. Modellen beaktar biologisk och abiotisk nedbrytning, adsorption/desorption, advektion, speciering och avdunstning men inte sedimentation eller resuspension. Modellen har verifierats genom att jämföra uppmätta mot predikterade halter för de brittiska floderna Wear, Avon och Tame, men det var otillräckligt med observerade data för organiska substanser. För zink fick man dock generellt god överrensstämmelse.

<sup>24</sup>UWKIR research project WW02: Chemical Source Apportionment under the WFD <https://www.ukwir.org> Kräver ArcGIS, 10.0, 10.1, 10.2, Microsoft Access, SIMCAT version 14.8.

## SIMPLE BOX

SIMPLE BOX utvecklades av RIVM<sup>25</sup>, se t.ex. Schoorl et al (2016). Modellen är relativt enkel att använda. Det är en steady state deterministisk boxmodell, dvs den predikterar fördelning av ett ämne mellan olika matriser ("boxar" med luft, vatten, sediment, jord och biota). Massflöden och "öde" (fate) simuleras mellan en uppsättning "väl blandade" boxar på regional, kontinental och global skala (en s.k. Mackay III/IV nivå modell).

Processer som ingår är biologisk och abiotisk nedbrytning, adsorption/desorption, avdunstning och advektion, sedimentation och resuspension men inte speciering. SIMPLE BOX fungerar för organiska och oorganiska ämnen, inklusive baser och organiska syror samt metaller men i det senare fallet anger man även olika fördelningskoefficienter.

Simple Box är integrerad i EUSES. De koncentrationer som SIMPLE BOX predikterar används som bakgrundskoncentrationer vid lokala scenarier i EUSES (verktyg som används vid riskbedömningar av kemikalier på internationell nivå, se ovan). Ett standardscenarie som går att anpassa till nordiska förhållanden går att ta fram.

Predikterade halter har jämförts mot uppmätta halter av tetrakloretylen, lindan, fluoranten, benzo[a]pyrene och krysen. Avvikelse om normalt högst en tiopotens noterades för akvatisk miljö. Modellen kan dock inte användas för att t.ex. uppskatta om särskilda utsläppsförhållanden leder till koncentrationstoppar utan det är mer långsiktiga förlopp som är avsedda att modelleras och dessutom på en relativt grov skala (regional nivå, ej lokal), dvs. "rådande bakgrundsnivå för ett större område till följd av långsiktig upplagring".

## STORMTAC

STORMTAC används frekvent av svenska kommuner för att uppskatta behov av dagvattenrening på en specifik plats. Det kan därför vara användbart för att uppskatta betydelsen av dagvattentillförsel lokalt och beskrivs ytterligare i bilagan. Verktöget är enkelt att använda, med inbyggd hjälpfunktion, och ger en grov uppskattning för att identifiera behov av ytterligare undersökningar.

Schablonvärden ingår för ett 70-tal ämnen men dessa går att ändra vilket innebär att man kan anpassa beräkningarna till en platsspecifik situation. Att tänka på är att verktöget bara ska tillämpas på hårdgjorda ytor, inte naturliga system. Verktöget är kommersiellt (licenskostnader). Inga processberäkningar görs. Genom en GIS-karta överförs information om markanvändning till programmet. De uppskattade halterna i recipienten baseras helt på uppskattad landavrinning och trafikintensitet (fordon/dygn). Ju mer detaljer man matar in desto "bättre" upplösning.

## STREAM-EU

---

<sup>25</sup> Fritt att ladda ner för användning på icke-kommersiell basis ([http://www.rivm.nl/en/Topics/S/Soil\\_and\\_water/SimpleBox/Simplebox4\\_0\\_form](http://www.rivm.nl/en/Topics/S/Soil_and_water/SimpleBox/Simplebox4_0_form)).

STREAM-EU (Spatially and Temporally Resolved Exposure Assessment Model for European basins), är en dynamisk en-dimensionell massbalansmodell för att prediktera organiska miljögifters öde i avrinningsområden i stor skala och baseras på indata från HYPE. STREAM-EU utvecklades av Deltares<sup>26</sup> och har implementerats i Delft 3D WAQ Framework<sup>27</sup> och har verifierats för PFOS och PFOA. Modellen används inom SOLUTIONS projektet för att prediktera halter av ca 6000 ämnen i 23 000 avrinningsområden (EU28+NO+CH) för att upptäcka nya potentiella ”emerging substances”, områden som är särskilt belastade och ”blandningar” att prioritera. Data för mer kända ämnen (läkemedel, pesticider och REACH registrerade kemikalier) används för att verifiera resultaten för de ämnen där det finns relativt få data. Relativt god överensstämmelse mellan uppmätta och predikterade halter för pesticider (verifierats mot uppmätta halter i Vege Å) men modellerade data stämmer sämre överens med uppmätta data när det gäller REACH-ämnen och läkemedel. Bristerna tycks dock i hög grad vara relaterade till brister i utsläppsdata snarare än själva modelleringsverktyget.

## TELEMAC

TELEMAC bygger på open source<sup>28</sup> och utveckling sker kontinuerligt. Verktyget beaktar i dagsläget hydrodynamiska processer (strömmar och vindförhållanden; advektion och dispersion), dvs spridning och spädning när det gäller kemiska ämnen. Ämnen sprids konservativt i vattenmassan. TELEMAC används för spridningsberäkningar på lokal eller regional nivå och används vid t ex tillståndsprövar, framförallt för spridningsmodellering av näringsämnen. Det kan även uppskatta sedimentspridning vid muddring.

## TRIM-FATE

TRIM (Total Risk Integrated Methodology) är en ”total” risbedömningsmodell och består av tre system: miljömodellering, humanexponering och riskkaraktärisering och har utvecklats av USEPA<sup>29</sup>, se t.ex. fallstudie av Murphy et al 2002. TRIM-FATE är fritt tillgängligt och manual finns men modelleringsexpertis behövs. Nedan beskrivs främst miljödelen.

TRIM-FATE är en flexibel multi-media modell som inkluderar luft, jord, sediment och grundvatten men även flera olika typer av biota (trofinivåer, pelagiska och bottenlevande mm). Modellen går att använda för sjöar och vattendrag men inte marin miljö. Den kan användas för modellering på nationell, regional och lokal nivå. Flertalet processer beaktas: biologisk och abiotisk nedbrytning, adsorption/desorption, avdunstning, advektion, speciering, sedimentation och resuspension. Inom en och samma matris antas jämvikt råda mellan olika faser (gas/vätske/fast fas), dvs. koncentrationer i övriga faser räknas fram genom att utgå från koncentrationer i en av faserna och med utgångspunkt från jämviktskoefficienter. Advektion och dispersionsflöde beaktas genom att utgå från en överföringshastighet mellan två sammanlänkade matriser. Advektiva flöden härleds från en hydrologisk modell. Alla ämnen kan modelleras och

<sup>26</sup> <http://oss.deltares.nl/web/delft3d/about>

<sup>27</sup> Delft, modell utvecklad av Deltares i Nederländerna. Open source och gratis men modelleringsvana behövs för att använda det.

<sup>28</sup> <http://www.opentelemac.org/>

<sup>29</sup> <https://www.epa.gov/fera/download-trimfate>

även osäkerheter och variabilitet i uppskattningarna kan bedömas (MonteCarlo i steady state model, se även Hetes & Langstaff, 2000).

### **wPRISMA och wPOLIS**

Interaktivt kartverktyg som används i Grekland för att identifiera vattenförekomster där det förekommer betydande påverkanstryck, för demo se hemsida<sup>30</sup>. Verktyget används för att beräkna ”begränsningsvärden” (ELV, emission limit values) snarare än predikterade koncentrationer i recipienten. Det baseras på en en-dimensionell steady state spridningsmodell (deterministisk box modell) för tungmetaller och bekämpningsmedel i inlandsvatten. Belastningsdata hämtas från den nationella E-PRTR rapporteringen och nationella data för utsläpp från grekiska reningsverk. För att uppskatta halter av bekämpningsmedel används FOCUS SW och CORINE marktäckedata. Hydrologiska data hämtas från E-HYPE.

wPRISMA är utvecklat för Grekland men skulle gå att anpassa till Sverige genom att lägga in bl.a. hydrologiska data. Modellen är också i dagsläget begränsad till metaller och läkemedel men skulle kunna utvecklas. Har inte verifierats.

wPOLIS används för att beräkna utsläppsgränsvärden (ELVs). Ämnesdata är inbyggt och kan inte ändras av användaren. Å andra sidan behöver man bara mata in vattenförekomst, ämne, hydrologiskt år och gränsvärden.

## **Luftmodeller**

Beskrivningarna nedan bygger helt på underlag från IVL.

### **TAPM (The Air Pollution Model)**

TAPM är en prognostisk modell för meteorologiberäkningar<sup>31</sup>. Modellen har utvecklats av CSIRO i Australien och verifierats i Australien, USA och Sverige (Chen et al ., 2002; Tang et al., 2009). Resultaten visar på mycket god överensstämmelse mellan modellerade och uppmätta värden. TAPM har t.ex. använts för att uppskatta spridning hos kvicksilverutsläpp till luft från en svensk punktkälla i Stenungsund, med 125 meters geografisk upplösning. Modellerade resultat stämde väl överens med uppmätta lufthalter i fält på ett avstånd om ca 600 m (Wängberg et al 2005). Man kom i samma studie också fram till att våtdepositionen av kvicksilver fördubblades inom en 1 km radie från källan men att det mesta snabbt spreds över stora ytor, dvs. snarare bidrog till den generella belastningen av kvicksilver. TAPM användes också för att uppskatta luftspridningen av bly, arsenik och kadmium från Rönnskärsverken (Haeger-Eugensson et al 2008).

För beräkningarna i TAPM behövs indata i form av meteorologi från storskaliga synoptiska väderdata, topografi, markbeskaffenhet indelat i 31 olika klasser (t.ex. is/snö, hav olika tätortsklasser m.m.), jordart, havstemperatur, markfuktighet mm. Topografi, jordart och

<sup>30</sup> <http://switchon.emvis.gr/prisma> <http://switchon.emvis.gr/polis>

<sup>31</sup> Mer detaljer om modellen kan erhållas via [www.dar.csiro.au/TAPM](http://www.dar.csiro.au/TAPM)

markanvändning finns inlagd i modellens databas med en upplösning av ca 1x1 km men kan förbättras ytterligare genom utbyte till lokala data. Utifrån den storskaliga synoptiska meteorologin simulerar TAPM den marknära lokalspecifika meteorologin ner till en skala av ca 1x1 km utan att behöva använda plats-specifika meteorologiska observationer. Modellen kan utifrån detta beräkna ett tredimensionellt vindflöde från marken upp till ca 8000 m höjd, lokala vindflöden så som sjö- och landbris, terränginducerade flöden (t.ex. runt berg), omlandsbris samt kalluftsflöden mot bakgrund av den storskaliga meteorologin. Även luftens skiktning, temperatur, luftfuktighet, nederbörd mm beräknas horisontellt och vertikalt.

Med utgångspunkt från den beräknade meteorologin beräknas halter för olika föroreningsparametrar timme för timme till ca 100x100 gridupplösning. Beräkningarna inkluderar, förutom dispersion, även kemisk omvandling av SO<sub>2</sub> och partikelbildning, fotokemiska reaktioner (bl.a. NO<sub>x</sub>, O<sub>3</sub> och kolväte) i gasfas samt våt- och torrdeposition. Förutom de fördefinierade kemiska processerna kan även andra ämnens kemiska nedbrytnings- samt depositions-hastigheter definieras i modellen och på så sätt inkluderas kemisk nedbrytning även för dessa ämnen.

Långdistanstransporterade luftföroreningar kan definieras genom att koppla timupplösta halter till modellkörningarna. Biogena ytemissioner (VOC) kan också inkluderas. Detta har visat sig vara viktigt för både ozon- och partikelbildningen (Pun et al., 2002).

## ADMS

ADMS<sup>32</sup> är en diagnostisk dispersionsmodell som är utvecklad av Cambridge Environmental Research Consultants (CERC) i Storbritannien. Den används för att simulera emissioner från punkt- eller ytkällor (d.v.s. med varma gaser eller som passiva utsläpp) till atmosfären. Modellen används både för beräkning av industriutsläpp och i luftkvalitetsövervakningssyften i t.ex. urbana miljöer. Modellen inkluderar effekter av byggnader, topografi och kust/inlandseffekter samt viss kemi vid dispersions-beräkningarna.

ADMS kan, förutom vanlig dispersion, även beräkna t.ex. torr- och våtdeposition. Beskrivningen av modellens vertikala dispersionsprocesser görs genom beskrivning av det atmosfäriska gränsskiktets tjocklek (den s.k. blandningshöjden) och genom beräkning av den s.k. Monin-Obukhov längden. Vid beräkning av dispersionen under konvektiva meteorologiska förhållanden (effektiv vertikal spridning) används en s.k. sned Gaussisk koncentrationsfördelning.

---

<sup>32</sup> Cambridge Environmental Research Consultants Ltd. 2007: ADMS - 4 Atmospheric Dispersion Modelling System – User Guide, Version 4.

# Modelleringsverktyg för metaller och miljögifter i akvatisk miljö

Resultat från en inventering

I rapporten beskrivs ett trettiotal idag tillgängliga modelleringsverktyg för metaller och miljögifter i akvatisk miljö. Denna kunskapssammanställning är tänkt att underlätta vidare analys av vilka modeller som skulle kunna vara användbara inom t.ex. vattenförvaltningen.

Havs- och vattenmyndighetens rapport 2018:32  
ISBN 978-91-88727-23-7

Havs- och vattenmyndigheten  
Postadress: Box 11 930, 404 39 Göteborg  
Besök: Gullbergs strandgata 15, 411 04 Göteborg

[www.havochvatten.se](http://www.havochvatten.se)