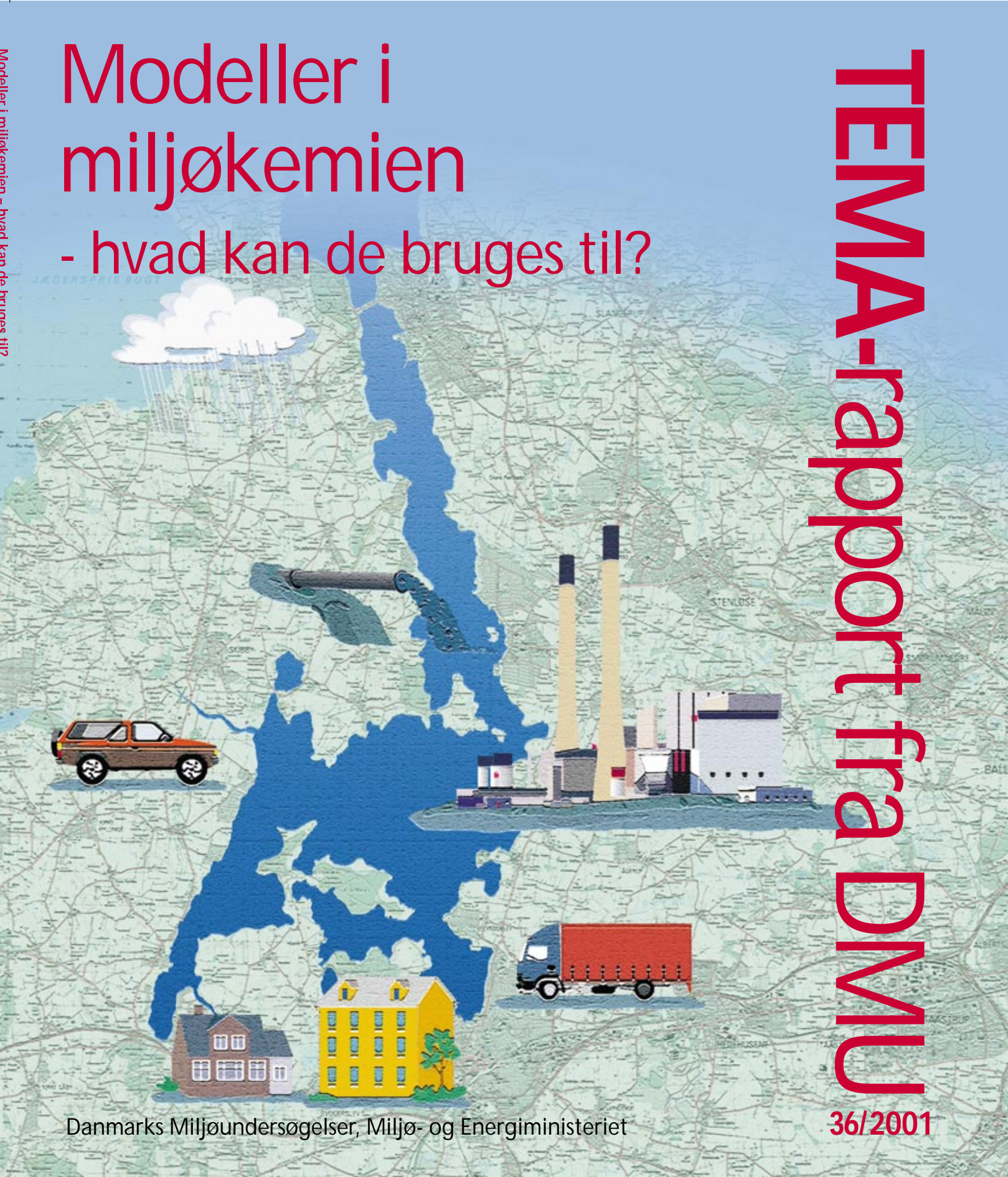


Modeller i miljøkemien

- hvad kan de bruges til?

TEMA-rapport fra DMU

36/2001



Modeller i miljøkemien

– hvad kan de bruges til?

Patrik Fauser
Peter B. Sørensen
Lars Carlsen
Afdeling for Miljøkemi

Danmarks Miljøundersøgelser
Miljø- og Energiministeriet
2001

TEMA-rapport fra DMU, 36/2001.
Modeller i miljøkemien

Forfattere: Patrik Fauser, Peter B. Sørensen, Lars Carlsen

Udgiver: Miljø- og Energiministeriet, Danmarks Miljøundersøgelser ©
URL: <http://www.dmu.dk>
Udgivelsestidspunkt: Maj 2001

Layout, illustrationer og produktion: Linda Fischlein & Britta Munter, Grafisk Værksted,
DMU, Roskilde.
Omslagsillustration: Linda Fischlein
Gengivelse tilladt med tydelig kildeangivelse.

Tryk: Scanprint, ISO 14001 Miljøcertificeret, EMAS miljøregistreret DK-S-0015.
ISO 9002 kvalitetsgodkendt. Papir: Cyclus Print, 100% genbrugspapir med vegetabiliske
trykfarver uden opløsningsmidler. Omslag lakeret med vandbaseret vegetabilisk lak.



Sideantal: 40
Oplag: 2000

ISSN (trykt): 0909-8704
ISSN (elektronisk): 1399-4999
ISBN: 87-7772-611-1

Pris kr. 40,-. Klassesæt á 10 stk. kr. 300,-. Abonnement (5 numre) kr. 225,- (Alle priser er
incl. 25% moms, excl. forsendelse).
Rapporten kan også findes som PDF-fil på DMU's hjemmeside.

Købes i boghandelen eller hos:
Danmarks Miljøundersøgelser
Frederiksborgvej 399
Postboks 358
4000 Roskilde
Tlf: 4630 1200
Fax: 4630 1114

Miljøbutikken
Information & bøger
Læderstræde 1-3
1201 København K
Tel: 3395 4000
Fax: 3392 7690
E-mail: butik@mem.dk
URL: www.mem.dk/butik

Indhold

Hvad er en model	6
Modeller af virkeligheden	6
Virkelighed, kriterier spørgsmål og brugere	8
Modeller i hverdagen	8
<i>Landskabsmodel</i>	8
<i>Fotomodel</i>	10
<i>Vejrmodel (prognose)</i>	10
Miljømodeller	13
Hvordan kan man med fordel bygge modeller	15
Et DBP molekyles skæbne	15
Molekylets struktur bestemmer egenskaberne i miljøet	20
Roskildeområdet beskrevet i modeller	22
DEHP i Roskilde Fjord	27
Opsummering af fremgangsmåde	37
Sammenfatning	38
DMU	39
Tidligere TEMA-rapporter fra DMU	40



Indledning

Vi lever i et samfund, hvor de ting vi foretager os kan få stor betydning for os selv og vore omgivelser. Da 2. Verdenskrig blev afsluttet med to atombomber stod det klart, at mennesket snart ville være i stand til at ødelægge stort set alt højerestående liv på jorden. Siden er det på mindre dramatisk vis blevet klart, at også andre teknologier og aktiviteter kan få store konsekvenser, der ikke altid er tilsigtede. Som eksempel kan nævnes at meget tyder på at den såkaldte drivhuseffekt, skyldes en øget mængde drivhusgasser i atmosfæren.

Nogle konsekvenser er så alvorlige, at der skal gøres en stor indsats for at undgå at de opstår. De skal altså opdages, før de opstår. En sådan forudsigelse af konsekvenser kaldes en konsekvensanalyse.

Der bliver udført mange konsekvensanalyser i det moderne samfund inden for alle mulige områder. Man hører ofte i medierne om, hvilken betydning et økonomisk indgreb vil have for boligejerne, hvordan

leveomkostningerne bliver for fremtidens pensionister, og hvordan brugen af hormonforstyrrende stoffer kan påvirke sundheden for mennesker og miljø. Alle den slags resultater bygger på en eller anden form for konsekvensanalyse.

På denne måde forsøger vi at styre vores samfund uden om de værste konsekvenser. Det kan imidlertid være svært at lave sikre konsekvensanalyser, da det er meget svært at forudse alle de mulige uheldige konsekvenser i et højteknologisk samfund.

Det er også svært at bruge erfaringer, når der hele tiden udvikles nye teknologier, verdensbefolkningen stiger og levemønstrene ændres. Erfaring må nødvendigvis bygge på „gamle“ skader, men når skaderne er alvorlige, er det en dårlig løsning. I teorien kunne man stoppe opfindelsen af ny teknologi og dermed standse den teknologiske udvikling. Men det er nok ikke det, de fleste ønsker, når det kommer til stykket, så man må prøve, så godt det er muligt at forudse uheldige konsekvenser ved vores samfunds virke.

En oplagt og meget brugt form for konsekvensanalyse er at beregne, hvilke konsekvenser nogle bestemte aktiviteter kan tænkes at få. Hvis der kan sættes et regnestykke op, der beregner konsekvenserne, så kan de findes inden skaden sker, og de kan derved undgås med passende indgreb.

Mange aktiviteter påvirker miljøet og sundheden. Det kan være kemiske stoffer, der kommer ud i miljøet og påvirker dyr, planter og mennesker på en uheldig måde. Stofferne kan enten være giftige eller på anden måde ændre på de naturlige forhold i miljøet.



Foto: Scamp/Reuters

Menneskets handlinger kan få store konsekvenser for miljøet.

Selvom kuldioxid er et helt naturligt stof og ikke er giftigt som sådan, så tyder meget på, at menneskets udledning af kuldioxid kan påvirke hele jordens klima med store konsekvenser til følge. På lignende måde er nitrat og fosfat vigtige naturlige stoffer, men hvis der udledes for meget af dem fra landbrugets marker, ødelægges dyre- og plantelivet i søerne, fordi grønalg gror unaturligt meget og måske kvæler det naturlige liv. Helt naturlige stoffer kan altså godt have uheldige konsekvenser for miljøet.

Det er klart, at giftige stoffer er skadelige, når de slipper ud i miljøet, og det er ikke rart at opdage, at nogle af de konsekvenser på sundhed og miljø, der allerede er konstateret, skyldes netop menneskets brug af disse stoffer.

Det vil altså være godt, hvis det var muligt at beregne konsekvenserne inden de opstår, så man kan blive advaret i tide og nå at lave de nødvendige tiltag. Et eksempel på den slags beregninger er de såkaldte matematiske miljømodeller, eller bare miljømodeller, og de bliver brugt i stadigt stigende omfang.

I denne Temarapport vil vi vise, hvordan man kan bygge miljømodeller op for helt konkrete problemstillinger. Eksemplerne vil vise, at selvom problemerne kan virke svære og uoverskuelige, vil en fornuftig og systematisk gennemgang i de fleste tilfælde føre til gode og simple modeller.

Men inden vi går i gang med miljømodellerne, vil vi kort gennemgå hvad en model egentlig er, og give et par eksempler på helt almindelige modeller, som vi møder hver dag i aviser og blade.



Foto: ©Danmark

CO₂ i atmosfæren påvirker klimaet.



Foto: ©Danmark

Landbrug har stor betydning for miljøet.



Foto: DNU/Peter Bonde Christensen

Udledning af nitrat og fosfat giver kraftig algevækst, der kan ødelægge dyrelivet.

Hvad er en model?

Modeller af virkeligheden

Til højre:
Klippemaleri af jagtscene fra
Tasillibjergene. Centrale Sahara.

Herunder:
De tre store pyramider
„Cheops“, „Kefren“ og
„Mykerinos“. Forskere mener
at de er gengivelser af de tre
store stjerner i Orion's bælte.

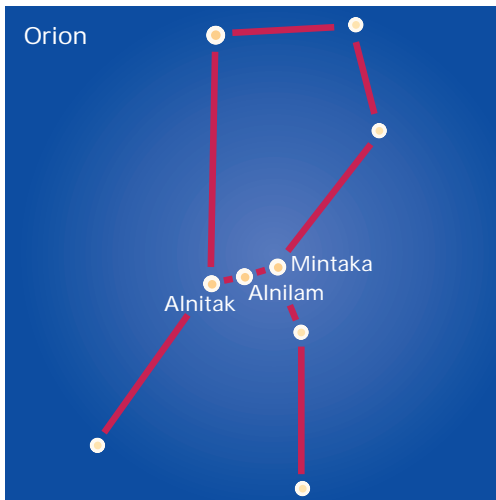
Ethvert forsøg på at lave et billede af virkeligheden er en model. Det betyder, at modeller har eksisteret lige så længe, som det tænkende menneske har eksisteret. Fra håndmalede billeder i huler, der viser menneskenes jagt på dyr over ægypternes fantastiske pyramider, der formodes at gengive stjernerne i stjernebilledet Orion's indbyrdes størrelse og placering, til den mo-



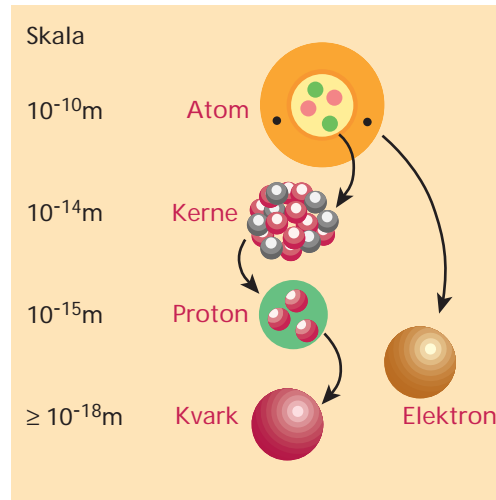
Foto: Barbara Klaus D. Benzien



Foto: Scamper/Diffusion Photo



Til venstre
Stjernebilledet Orion.
I Orion's bælte ses de tre store
stjerner: „Alnitak“, „Alnilam“
og „Mintaka“.



Til Højre
Model af et atom, med kerne af
protoner, neutroner og kvarker
samt elektroner der bevæger
sig rundt om kernen.

derne forestilling om universets opståen ved det såkaldte "Big bang". I alle tilfælde er der tale om modeller.

Det billede, der dannes af en model, er et forenklet billede af virkeligheden. Modellen kan ikke indeholde alle virkelighedens detaljer, da den i givet fald vil være selve virkeligheden og ikke en model af den. Modeller vil derfor indeholde fejl, eller usikkerheder, som giver en afvigelse i forhold til virkeligheden.

For at kunne lave en model kræves det, at man i forvejen ved noget om det, der skal beskrives. Det er imidlertid svært at afgøre, hvornår man har tilstrækkelig viden til at kunne lave en god model.

Da Rutherford i 1911 offentliggjorde en model af atomet, bestod det af en positivt ladet kerne omgivet af negativt ladede elektroner. Senere introducerede Bohr orbitalerne, der ledte til en mere avanceret atommodel, hvor elektronerne bevægede sig omkring kernen i sandsynlige baner. Endnu senere blev der identificeret endnu mindre dele i atomet, de såkaldte kvarker, som øgede kompleksiteten af atommodellen yderligere. Hvad har man mon fundet ud

af om hundrede år og hvornår har man tilstrækkelig information til at lave den bedst mulige model af det virkelige atom? Det er ikke sikkert at mere viden om virkeligheden giver en bedre model. Det altafgørende er at tage den viden, der beskriver den del af virkeligheden, man skal bruge. Er det nødvendigt at kende kvarkernes tilstedeværelse, hvis man ønsker at kende opløseligheden af kogsalt i vand?

Før man begynder at lave modeller, skal man altså tænke sig godt om. Hvad er det man ønsker, at modellen skal give svar på, og hvilke svar har man ikke behov for. Er der i det hele taget et behov for modellen? Kan simple observationer af virkeligheden klare det, som modellen er lavet til at kunne beregne? En model kan være et meget effektivt værktøj, hvis den anvendes korrekt, men at anvende en model for enhver pris er en alvorlig fejltagelse, da den aldrig vil kunne sidestilles med virkeligheden.

Virkelighed, kriterier, spørgsmål og brugere

En model er et forsøg på at beskrive virkeligheden ud fra et sæt kriterier. Et kriterium er en egenskab (f.eks. regnmængde), der beskriver en del af virkeligheden (f.eks. vejret). Kriterierne er udvalgt med det formål at give svar på spørgsmål, som en person (bruger) ønsker belyst.

En model kræver altså følgende:

- En *virkelighed*, der ønskes beskrevet
- Udvalgte *kriterier* til beskrivelse af virkelighed
- *Spørgsmål*, der ønskes besvaret af modellen
- En *bruger*, der stiller spørgsmålene.

Derudover skal der være en modelhåndværker, der skal oversætte virkeligheden og brugerens spørgsmål til en anvendelig form, og det er typisk her, at kriterierne findes.

Et modelresultat er altså fundet ud fra et sæt kriterier og fra nogle spørgsmål, som brugeren har stillet. I kriterierne indgår et antal parametre (f.eks. fordampningsvarme), og når først kriterierne er indarbejdet i modellen, står det frit for brugeren at ændre parameter værdierne, så de passer til den ønskede problemstilling. Når parameter værdierne ændres, så vil *outputtet* = modelresultatet også ændres. Heri ligger en af modellens store styrker, den kan *forudsige* forløbet af virkeligheden under ændrede forhold.

I nogle tilfælde bliver en model måske brugt til at besvare andre spørgsmål end dem, der blev brugt til at lave modellen ud fra. Det kan give forkerte resultater hvis man ikke tager højde for andre kriterier, der er nødvendige til at besvare de nye spørgsmål.

Til at illustrere hvad disse ovenstående definitioner kan bruges til, kan vi se på nogle helt dagligdags modeller.

Modeller i hverdagen

Landskabsmodel (kort)

Man ønsker i mange situationer en beskrivelse af landskabet. En sådan beskrivelse – eller model – kalder vi for et kort. Et kort over Sjælland kan for eksempel have skove, søer, åer og bakker indtegnet. Ønsker man at finde et godt fiskested eller en skov at plukke svampe i, vil kriterierne for optegning af kortet opfylde brugerens behov.

Ønsker man at komme fra Helsingør til Vordingborg hurtigst muligt, vil kortet derimod være værdiløst, da de nødvendige kriterier vil være en oversigt over vejnettet med motorveje, landeveje og byer.

Er man pilot og ønsker at lande sin flyvemaskine et sted på Sjælland, vil det førstnævnte kort til nød kunne bruges, men man vil nok foretrække et kort med lufthavne og landingsbaner.

Det hjælper heller ikke altid at tage flere detaljer med. Vejnettet i det indre København vil ikke kunne give nyttige oplysninger til bilisten, der skal fra Helsingør til Vordingborg.

Den bedste model vil give et resultat som brugeren ikke kan drage fejlagtige konklusioner af, og som kun indeholder oplysninger, der er relevante for brugeren.

Hvad er en model?



Landskabsmodeller (kort):
Det øverste kort viser højdekurver og skove omkring Roskilde Fjord.

Det nederste kort viser vejnettet i Nordsjælland med motorveje (røde) og andre veje (grå).

Kortene giver forskellige informationer, der kan hjælpe f.eks. trafikanter.

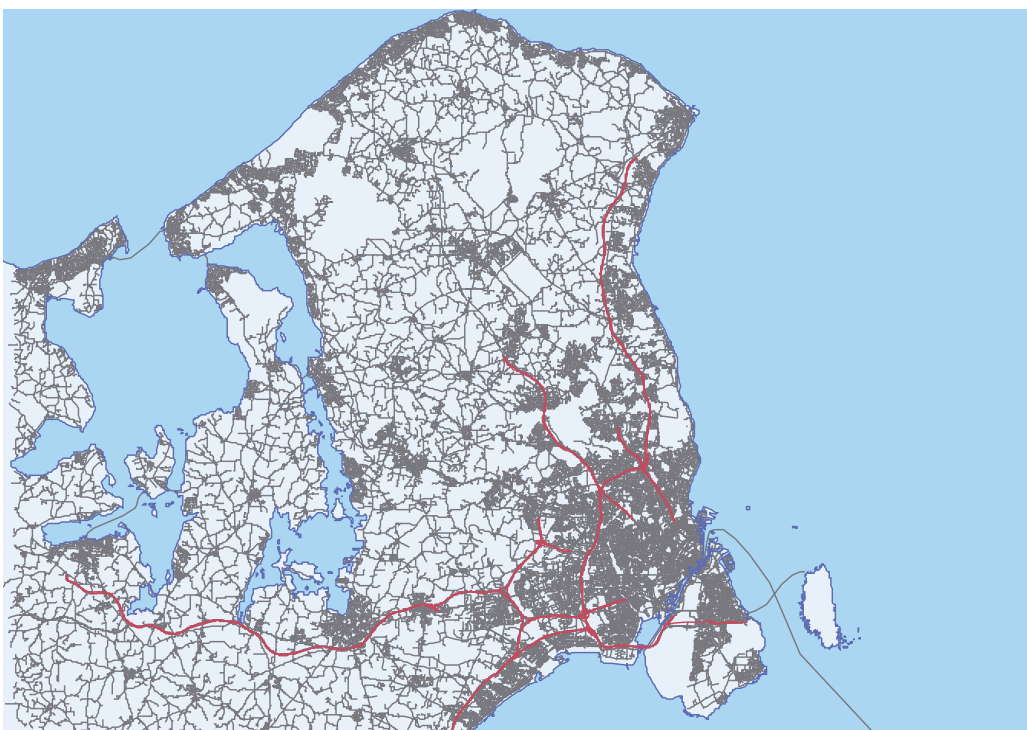


Foto: Björnt/Dieter Batz



Foto: 2maj/Sonja Iskov



Foto til højre: Scamp/Mogens Ladegaard. Foto til venstre: Scamp/Brian Kærmark

Mennesker kan også være modeller.

Fotomodel

Personerne på billedet er modeller. Man kan spørge sig selv, hvad det er for en virkelighed, der er beskrevet.

Brugeren er i dette tilfælde modeindustrien og tøjproducenterne, der ønsker at sælge sine varer. Det spørgsmål, der stilles er: "Hvordan skal/vil kvinden og manden se ud, for at kunderne køber mest muligt". For at svare på det spørgsmål er det nød-

vendigt at se på en række kriterier, der tilsammen beskriver de kroppe, som allerbedst passer til at sælge tøj. Kriterierne har i dette tilfælde udviklet sig over mange generationer af almindelige mennesker og i særdeleshed af "specialister", der mener at have det endelige svar på, hvordan kvinder og mænd skal se ud. De opstillede kriterier er et resultat af det miljø og de omgivelser, der skaber modellen.

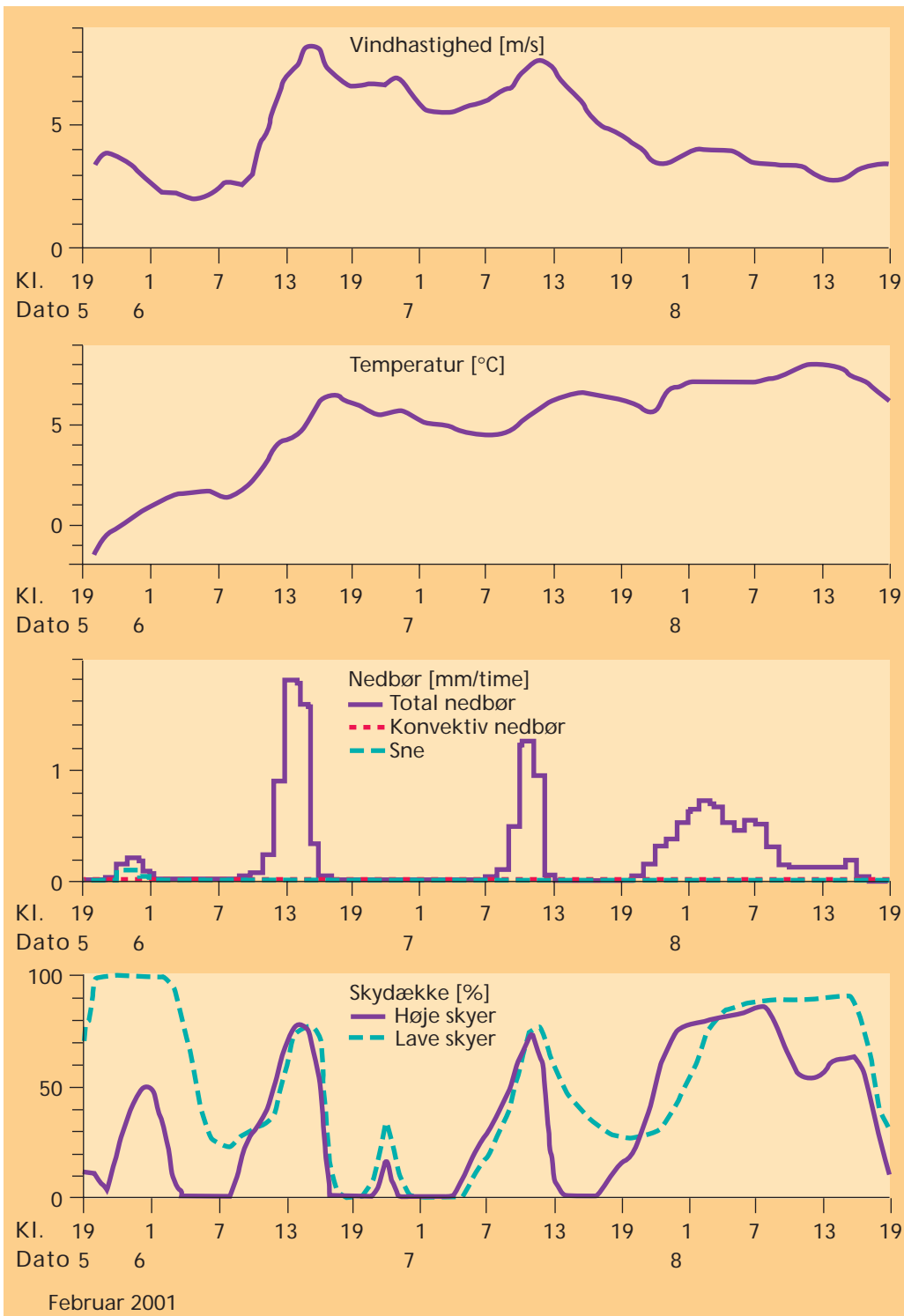
Modellen af virkelighedens mennesker på billedet er altså i høj grad dannet af en subjektiv vurdering, og opfylder sit formål, idet den sørger for at forudsige trenden inden for udseendet af kvinde- og mandekroppen, hvis tøjet skal sælges.

Men man skal samtidig være opmærksom på, at den kun beskriver en del af virkeligheden, nemlig den del, der besvarer de subjektivt stillede spørgsmål. Ser vi os omkring, ligner kun de færreste mennesker disse "idealbilleder". Der er altså tale om en ønsket virkelighed, hvor modellerne søger at vise en idealiseret - og derfor forkert - virkelighed. Den svarer ikke på andre spørgsmål, der sammen vil give en mere fuldstændig beskrivelse af virkeligheden. Et mere væsentligt spørgsmål (bemærk igen subjektiviteten) kunne være: "Hvordan ser en krop ud, der harmonerer bedst med personligheden". Modellerne ville ganske givet blive nogle andre.

Vejrmodel (prognose)

Hver dag kan vi se prognoser for, hvordan vejret bliver i dag og i de kommende dage. Som eksempel kan vi tage 3 døgns prognosen på næste side.

En prognose er et forsøg på at forudsige forløbet af virkeligheden. Virkeligheden (vejret) er et produkt af et antal kemiske og fysiske processer på og omkring jorden. Mange af disse processer er indbyrdes af-



3 døgns prognose for temperatur, vindhastighed, nedbør og skydække. Danmarks Miljøundersøgelser, 2001.

hængige, hvilket gør, at en fuldstændig gengivelse af vejrsystemet er en uoverkommelig og faktisk også en overflødig opgave.

Spørgsmålet er ganske simpelt: "Hvordan bliver vejret i dag og i de kommende dage"? Brugerne er typisk almindelige mennesker, der vil vide om de skal tage shorts, regnfrakke eller hue og vanter på. Spørgsmålet kan besvares ved at se på 4 subjektivt bestemte delkriterier, der samlet giver de informationer, der tilfredsstillter brugernes spørgsmål om vejret:

- Temperatur (maksimum og minimum)
- Nedbør
- Vindhastighed og -retning
- Skydække (solindstråling)

Håndværkerne (meteorologerne, matematikerne, fysikerne, kemikerne, programmørerne) oversætter kriterierne til konkrete fysiske og kemiske udtryk. Heri indgår parametre, der er med til at bestemme resultatet af modelberegningerne.

Når modellen er færdig og klar til brug, kan man i princippet beregne vejret vilkårligt langt ude i fremtiden. Det kræver dog, at man kender alle parametre helt præcist, og har en meget god teoretisk beskrivelse af vejret.

Parameterværdier er imidlertid umulige at bestemme præcist, og de vil derfor give et modelresultat, der heller ikke er præcist.

Mange parametre er resultater af modelberegninger, og forsøger man at bruge upræcist beregnede modelresultater til at beregne nogle nye, så vil afvigelsen blive større og større for hver beregning. Derfor har man med den nuværende viden en tids-horisont for vejrberegninger på ca. en uge, så vi som brugere ikke skal fortvivle helt på grund af meteorologernes forkerte spådomme.

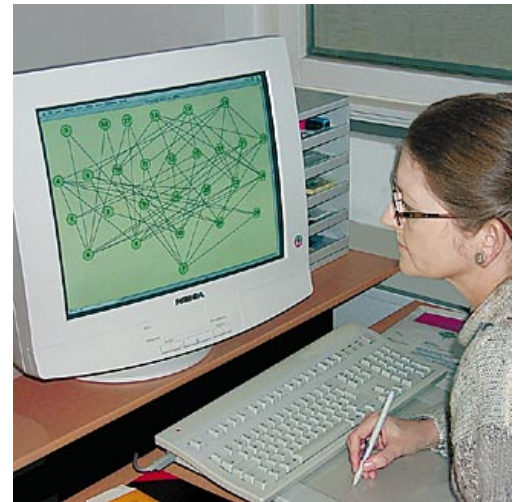


Photo: DMU/Patrik Fausser

Eksemplerne viser, at en model kan bruges til at give svar på mange ting. En model er ikke nødvendigvis noget stort og komplekst med avanceret matematik, men ofte er den en simpel fortolkning af virkeligheden, dannet af de ydre rammer man færdes i.

De matematiske modeller, som vi skal beskæftige os med i det følgende, møder brugerne som oftest i form af computermodeller.

I computermodeller kan man ikke se, hvad der sker, når resultatet beregnes. Man trykker på en knap, aktiverer programmet i maskinen og får resultatet ud i den anden ende. Men hvad er det for et program, og kan man overhovedet blive venner med det? Man skal huske på, at det er lavet og skal passes af en programmør eller bruger, der skal fodre det med oplysninger, for at det skal kunne fungere. Matematikken er et redskab, der knytter virkeligheden med det forenklede system, som modellen beskriver.

Det kan godt være, at man ikke forstår matematikken, men derfor kan modellen alligevel være soleklar og fuldt forståelig.

Miljømodeller

På verdensplan er produktionen af kemiske stoffer eksploderet i dette århundrede. På det europæiske marked er der ca. 100.000 kemiske stoffer i omløb, og mange af disse stoffer findes ikke naturligt i miljøet. Derfor kalder vi dem *miljøfremmede stoffer*. På det danske marked er der ca. 20.000 miljøfremmede stoffer fordelt på ca. 70.000 produkter.

I denne rapport fokuseres der på de miljøfremmede *organiske* stoffer, det vil sige stoffer, der indeholder kulstofkæder eller -ringe. Produktionen af disse stoffer er på verdensplan steget fra én million tons i 1930 til mere end 300 millioner tons i 1990.

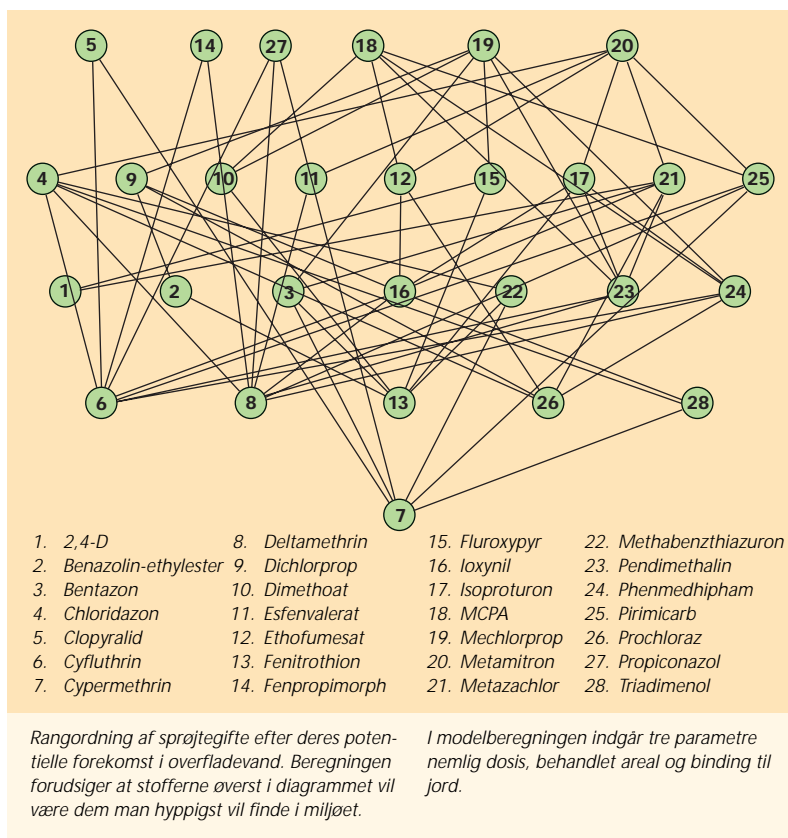
Miljøfremmede organiske stoffer forekommer i alle tænkelige sammenhænge. Den største del bruges i industrien, i byggematerialer, i landbruget som pesticider, i produktion af forbrugsvarer som for eksempel levnedsmidler, beklædning, medicin og diverse rengøringsmidler.

Til at varetage befolkningens sundhed og modvirke skader på miljøet er der formuleret en kemikalielov med love, regler og kontrolsystemer for de kemiske stoffer. I Danmark er det Miljø- og Energiministeriet, der administrerer denne lov. Da mange kemiske stoffer transporteres over landegrænser, er der også på europæisk plan gjort en indsats for at formulere internationale aftaler, der håndterer problemerne med de kemiske stoffer, og som er med til at harmonisere konkurrenceforholdene på det europæiske marked.

Tidligere kom langt de fleste stoffer på markedet uden nogen forudgående undersøgelser af, hvor høje koncentrationer man



I vores hverdag indgår en stor mængde kemikalier, der på den ene eller den anden måde kan belaste miljøet.



kunne forvente at finde i miljøet. Ligesom effekterne af stofferne på miljø og mennesker heller ikke var undersøgt på forhånd.

I mange situationer bliver et stof først udnævnt som problemstof, når problemerne allerede er opstået. Det gælder for eksempel det ildelugtende stof MTBE, der anvendes som benzin tilsætningsstof, og som nu er et problem i forbindelse med ned-sivning til grundvandet.

Det ville være bedre at undersøge et nyt stof grundigt, inden det blev anvendt.



Foto: CDanmark



Foto: CDanmark

Mennesket belaster miljøet på mange måder.

Øverst: Spildevandsudledning.

I midten: Røg fra industri.

Nederst : Sprøjtning i landbruget.



Foto: CDanmark

Hvem sagde modeller?

Miljøet er imidlertid meget kompliceret at beskrive, og det kan derfor virke som en umulig opgave at overskue og forudsige konsekvenserne af at anvende et stof, der normalt ikke forekommer i miljøet. Antallet af kilder er stort, og spredningsvejene er komplekse. Forekomsten afhænger af om stoffet er i luften, vandet eller jorden, og af forhold som temperatur, nedbør, vindretning med mere. Hvis man laver en model, der indeholder alle muligheder, så er chancen for at få et resultat, der er anvendeligt, meget lille.

Det er nødvendigt at lave et godt og grundigt forarbejde, hvor den nødvendige viden indsamles og udvælges af eksperter. Det vil så godt som altid vise sig, at man med en god og detaljeret videnindsamling vil kunne forenkle problemet til et overskueligt system, der er til at regne på. Modelleringen vil komme ind som en vigtig brik i indsamlingen af denne viden og give et resultat, som for eksempel kan bruges til at udvælge den teknologi, der vil være bedst egnet til løsning af et konkret problem, eller til at give oplysninger til en lovgivning, der vil fokusere på at reducere eller eliminere uønskede emissioner.

Brugen af miljømodeller er steget med stor hast siden den spæde start i 60'erne, og i dag vil en undersøgelse af et aktuelt miljøspørgsmål ofte ikke være fyldestgørende uden en form for model. Anvendelsesområderne er talrige, og blandt de mere kendte eksempler kan nævnes radioøkologien, der fik sin berettigelse i forbindelse med atomprøvesprængninger, og atmosfæremodeller, der peger på risici omkring drivhuseffekten og huller i ozonlaget.

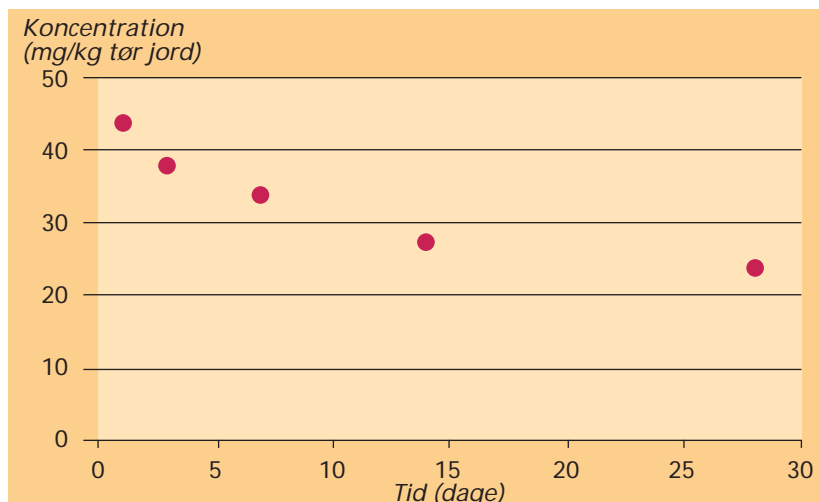
Hvordan kan man med fordel bygge modeller?

Miljømodeller bruges til at forudsige kemiske stoffers opførsel under bestemte forhold. De kan bruges på flere måder, da der kan stilles forskellige typer af spørgsmål. I nogle tilfælde skal laboratorieforsøg tolkes, til andre tider vil man lave en konsekvensanalyse, hvor den samlede konsekvens for miljøet ønskes beskrevet for et stof. En konsekvensanalyse kan igen indgå i en *risikovurdering*, der bestemmer risikoen for uønskede konsekvenser af et stof.

Det vil altid være en vurderingssag hvornår konsekvenser er uønskede, det er ikke noget som modeller kan svare på direkte. Et stofs giftighed kan måles over for forskellige dyr og planter, og hvis det viser sig, at stoffet faktisk – ifølge modellerne – kan forekomme i miljøet med koncentrationer, der er giftige, kan det betegnes som uønskede konsekvenser.

I de følgende eksempler fokuseres på, i hvor høje koncentrationer man kan finde et stof i miljøet (*forekomst*), som en konsekvens af, at det bliver brugt af mennesker. En endelig fastlæggelse af miljøbelastningen er imidlertid først mulig, hvis et stofs forekomst sammenholdes med hvor giftigt det er (*risikovurdering*), men af hensyn til pladsen behandles alene stoffernes forekomst.

Det er nu, vi skal til at beskrive virkeligheden som en model, og det mest hensigtsmæssige er at omformulere det virkelige system til en modelstruktur, der er simpel, overskuelig og som er til at regne på.



Et DBP molekyles skæbne

Stoffet i dette eksempel er Di-Butyl-Phthalat (DBP), der blandt andet bruges i maling, og som er et af de få stoffer, der har været undersøgt meget grundigt i forbindelse med en omfattende risikovurdering.

DBP undersøges i et laboratorium for at se, hvor let det nedbrydes i jord, og hvor kraftigt det binder sig til jorden.

Laboratorieforsøget er udført på følgende måde: En kendt mængde DBP og jord er blandet sammen i en beholder. Der er taget prøver fra beholderen til forskellige tidspunkter, og disse er målt for forekomst af DBP. Resultatet er vist i ovenstående figur.

Det ses, at DBP forsvinder efterhånden som tiden går. Men det er som om, at ikke alt DBP forsvinder, da koncentrationen ikke falder ret meget til sidst.

En matematisk model kan nu bruges til at forstå målingerne.

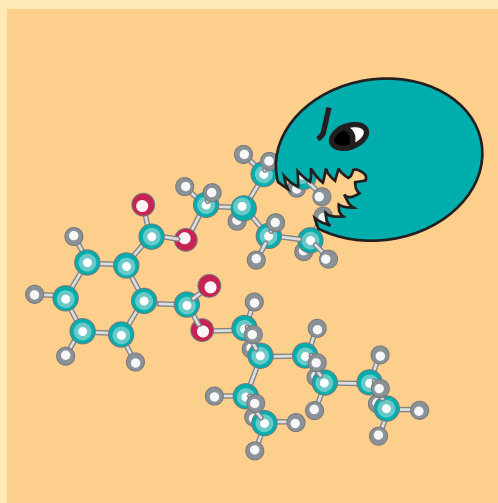
Laboratorieforsøg der viser hvordan koncentrationen af DBP i jord falder med tiden.

Boks 1: Nedbrydning og numerisk beregningsmetode

Der er flere måder at fjerne stoffer på, men en af de vigtigste er nedbrydning, der skyldes bakteriers arbejde, hvor de bruger såkaldte enzymer. Enzymer dannes af alle levende organismer og virker ved at klippe bestemte kemiske bindinger i et stof over, så delene kan indbygges i organismen, eller så den kan få energi til at leve. Denne nedbrydning er meget vigtig, da et uønsket stof på denne måde kan fjernes helt fra miljøet.

Det er kun opløste stoffer, der kan nedbrydes. Når de er bundet til jorden, kan enzymerne ikke ødelægge dem.

Et DBP molekyle har en vis risiko for støde ind i et enzymmolekyle og en vis chance for at søge tilflugt i en jordpartikel, hver gang der er gået et døgn. Antallet af DBP molekyler, der henholdsvis bliver nedbrudt og søger tilflugt er proportionalt med antallet af molekyler, der stadig opholder sig i vandet. Med andre ord: hvis indholdet i vandet af stofmolekyler halveres, så halveres det antal molekyler, der hhv. bliver nedbrudt og



søger tilflugt i løbet af det næste døgn også. Dette giver følgende ligninger:

Den mængde DBP, der nedbrydes i løbet af ét døgn er:

$$k_{\text{ned}} \cdot C_{\text{opl}} \quad (1)$$

hvor k_{ned} er andelen af molekyler, der nedbrydes i løbet af et døgn, og C_{opl} er koncentrationen af opløst DBP.

Den mængde DBP, der sætter sig på jordpartiklerne i løbet af ét døgn er:

$$k_{\text{fast}} \cdot C_{\text{opl}} \quad (2)$$

hvor k_{fast} er den andel af DBP, der sætter sig fast på jordpartiklerne i løbet af et døgn.

Den samlede mængde DBP, der forsvinder fra vandet gennem ét døgn fås ved at lægge de to ligninger sammen:

$$k_{\text{ned}} \cdot C_{\text{opl}} + k_{\text{fast}} \cdot C_{\text{opl}} = C_{\text{opl}} \cdot (k_{\text{ned}} + k_{\text{fast}}) \quad (3)$$

Koncentrationen af DBP ved starten af forsøget, $C_{\text{opl},0}$, kender vi, da vi ved hvor meget DBP vi har puttet i beholderen. Koncentrationen efter ét døgn betegnes $C_{\text{opl},1}$, og kan beregnes ud fra $C_{\text{opl},0}$ ved at fratække den mængde DBP, der er forsvundet i løbet af det første døgn:

$$C_{\text{opl},1} = C_{\text{opl},0} - C_{\text{opl},0} \cdot (k_{\text{ned}} + k_{\text{fast}}) = C_{\text{opl},0} \cdot (1 - k_{\text{ned}} - k_{\text{fast}}) \quad (4)$$

Når koncentrationen det første døgn er beregnet, kan koncentrationen i det andet døgn, $C_{\text{opl},2}$ beregnes ud fra $C_{\text{opl},1}$:

$$C_{opl,2} = C_{opl,1} \cdot (1 - k_{ned} - k_{fast}) \quad (5)$$

og sådan kan man blive ved med at beregne koncentrationen et døgn frem.

Vi kan på samme måde beregne den mængde DBP, der sætter sig fast på jordpartiklerne det første døgn:

$$C_{fast,1} = k_{fast} \cdot C_{opl,0} \quad (6)$$

I starten sidder der ikke noget DBP fast på jordpartiklerne, så: $C_{fast,0} = 0$. Efter to døgn er den mængde DBP der sidder fast, $C_{fast,2}$ bestemt ved

$$C_{fast,2} = C_{fast,1} + k_{fast} \cdot C_{opl,1} \quad (7)$$

Det vil sige den mængde, der sad fast efter et døgn plus den mængde, der har sat sig fast mellem det første og det andet døgn. Det gælder derfor, at $C_{fast,2}$ afhænger af både $C_{fast,1}$ og $C_{opl,1}$.

Koncentrationen af DBP hhv. i vandet og på jordpartiklerne til døgn nummer n kan nu beregnes af følgende ligninger:

$$C_{opl,n} = C_{opl,n-1} \cdot (1 - k_{ned} - k_{fast}) \quad (8)$$

$$C_{fast,n} = C_{fast,n-1} + k_{fast} \cdot C_{opl,n-1} \quad (9)$$

Denne måde at beregne koncentrationen døgn for døgn kaldes for en *numerisk* metode, og er meget egnet til løsning på computer i et regneark. Det er vist i tabellen, hvor de røde pile viser beregningsrækkefølgen for de første 3 døgn.

Beregningerne kræver imidlertid, at de to konstanter k_{ned} og k_{fast} er kendte. De kan findes ved at justere dem, så modelberegningerne i regnearket får bedst mulige overensstemmelse til målingerne af DBP. Hver gang man gætter på nye værdier af konstanterne beregnes der nye koncentrationer i regne-

arket. Når overensstemmelsen mellem beregnede og målte koncentrationer opfylder et krav man har sat, stoppes beregningerne, og konstanterne er fundet. Denne fremgangsmåde kaldes for en *kalibrering*.

Døgn nr.	Beregnet			Målt C_{total}
	C_{opl}	C_{fast}	$C_{total} = C_{opl} + C_{fast}$	
0	45	0	45	45,0 (kendt mængde)
1	39,5	2,9	42,4	43,6
2	34,7	5,4	40,1	Ikke målt
3	30,5	7,6	38,1	37,6

Målte og beregnede koncentrationer af DBP i jord (mg DBP pr. kg tør jord). Pilene viser beregningsrækkefølgen.

Af kalibreringen i tabellen er beregnet, at:

$$k_{ned} = 0.058$$

$$k_{fast} = 0.064$$

giver den bedste overensstemmelse.

Ændringen i den totale koncentration svarer til nedbrydningen. Det, at nedbrydningen beskrives med udtrykket $k_{fast} \cdot C_{opl}$ benævnes inden for modelverdenen som en første ordens nedbrydning, og er ofte brugt i selv meget komplicerede modeller.

En model med nedbrydning og fastholdelse vil altså kunne beskrive forholdene i beholderen godt: DBP vil søge hen til jordpartiklerne og væk fra vandet. Men under denne flugt ud af vandet kan DBP molekylerne støde sammen med enzymer, der kan nedbryde stoffet.

Ved en kalibrering findes de værdier af modelkonstanterne, der får modelresultatet til at passe med målingerne bedst muligt. Hvis konstanterne har omtrent samme værdi, som er fundet ved andre tilsvarende undersøgelser, så er det et tegn på, at modellen er rigtig. En anden måde at kontrollere modellen på er at se, om den kan beskrive et andet sæt eksperimentelle målinger godt. Vi har brugt et sæt målinger til at kalibrere modellen med, og det er "usundt" at bruge de samme målinger til at kontrollere modellen med. Det bedste er at kontrollere modellen med nogle nye målinger, hvor forholdene er anderledes.

Der er udført et forsøg med den samme jord og samme stof, men nu med ca. 10 gange højere startkoncentration af DBP. Den nye startkoncentration indsættes i regnearket, og koncentrationerne beregnes med de samme værdier af k_{ned} og k_{fast} som før.

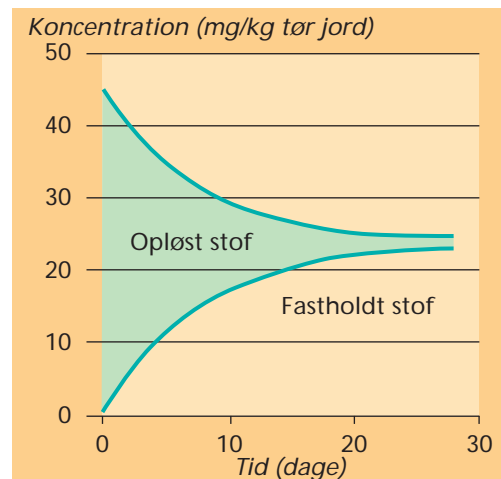
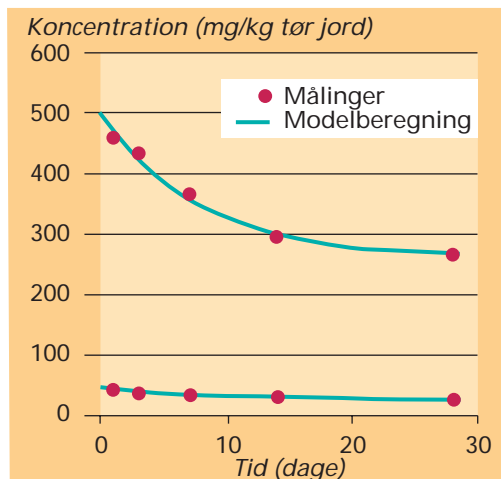
Resultaterne fra de to forsøg er vist på figuren til venstre, hvor den nederste kurve er det første og den øverste kurve er det andet forsøg. Modellen synes rimelig god til at efterligne det andet forsøg, på trods af at værdierne for henholdsvis k_{ned} og k_{fast} er fastlagt ved at kalibrere modellen til de lave koncentrationer. Der er derfor god grund til at tro, at modellen faktisk beskriver forholdene i forsøget godt nok. Dette, at man kontrollerer modellen ud fra andre måledata, kaldes for en *validering*.

Som vi bemærkede i starten, mindskes koncentrationen efterhånden som tiden går, men kun til en nedre grænse, hvorefter den er konstant. Hvad kan modellen give os af forklaring? Først og fremmest deles DBP op i to puljer: DBP opløst i vand og fastholdt i jorden.

Det ses af figuren til højre, at indholdet i vandet mindskes til fordel for indholdet i jorden. Grunden til, at alt stof ikke forsvinder er, at det DBP der fastholdes i jorden ikke kan nedbrydes. Det er kun den opløste mængde, der kan nedbrydes, og det er netop en af modellens forudsætninger. Selv om DBP bindes kraftigt til jorden er der dog mulighed for, at det kan frigives fra jorden til vandet (boks 2).

Til venstre:
Målte og beregnede DBP koncentrationer i jord ved 2 forskellige koncentrationsniveauer.

Til højre:
Modelberegninger af DBP koncentrationen i jord både for opløst og fastholdt stof, hvilket ikke kan ses af måleresultaterne.



Boks 2: Adsorption

Fastholdelsen af stof til overflader kaldes for adsorption. Det er en meget vigtig proces, da mange miljøfremmede stoffer, som for eksempel DBP, ikke kan lide vand, de kaldes hydrofobe.

I eksemplet forudsættes det, at stoffet forbliver fastholdt i jorden, når det først har sat sig fast, og der er god grund til at tro, at dette er tilfældet i den første periode efter at stoffet er tilsat vandet. Men betragtes der over en længere tidsperiode, kan det meget vel tænkes, at noget af det fastholdte stof frigives tilbage til vandet, dog måske kun i små mængder.

Lad os som før antage, at den mængde stof, der i løbet af et døgn fastholdes i jorden er beskrevet ved $k_{\text{fast}} \cdot C_{\text{opl}}$, og lad os antage, at den mængde, der frigives er beskrevet ved:

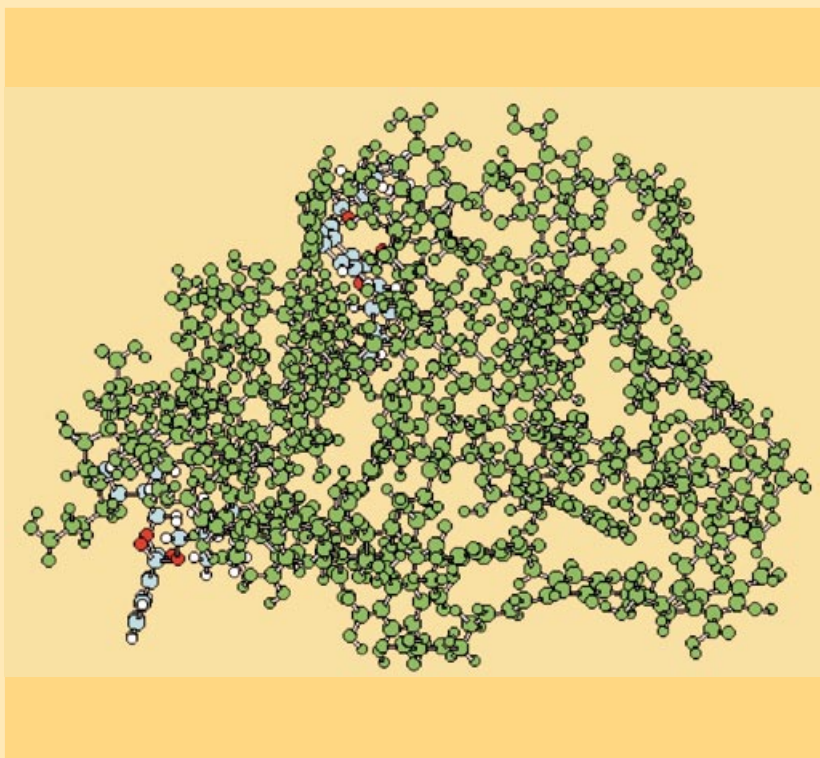
$$k_{\text{fri}} \cdot C_{\text{fast}} \quad (10)$$

hvor k_{fri} er den andel af det fastholdte stof, der bliver frigivet tilbage til vandet i løbet af et døgn. En sådan frigivelse kan måske skyldes, at molekylet simpelthen bliver slået fri og ud i vandet af et andet molekyle.

Hvis der går lang nok tid uden voldsomme påvirkninger (f.eks. tilsætning af nyt stof til vandet) vil fastholdelse og frigivelse blive lige store, hvilket betyder at:

$$k_{\text{fast}} \cdot C_{\text{opl}} = k_{\text{fri}} \cdot C_{\text{fast}} \quad (11)$$

Det betyder, at forholdet mellem den stofmængde, der sidder fast, C_{fast} , og den mængde, der er opløst, C_{opl} , kan beskrives ved:



To DBP molekyler fastholdes (adsorberes) til organisk stof i jord. Med tiden kan de dog frigives (desorbere) igen.

$$\frac{C_{\text{fast}}}{C_{\text{opl}}} = \frac{k_{\text{fast}}}{k_{\text{fri}}} = K_d \quad (12)$$

Forholdet mellem de to konstanter k_{fast} og k_{fri} , kaldes fordelingskoefficienten, K_d . En stor K_d -værdi udtrykker at stoffet er hydrofobt (C_{fast} er meget større end C_{opl}), og for mange miljøfremmede stoffer kan K_d -værdien let komme op på mange tusinde.

Næsten alle miljømodeller, der beskriver forekomsten af miljøfarlige stoffer forudsætter en sådan ligevægt mellem fastholdelse og frigivelse, selv om den i virkeligheden ikke er opstået. Frigivelsen vil imidlertid i mange tilfælde være så lille, at forudsætningen er acceptabel.

Stof, der hænger fast i jord, er ikke så giftigt for dyr som det opløste, fordi dyrene ikke kommer i kontakt med det bundne via vandet. Det betyder, at virkningen af stoffet på dyrene bliver stadig mindre, efterhånden som koncentrationen af opløst stof falder. Der er dog nogle dyr, der spiser jorden, f.eks. regnorme, og dermed alligevel får noget stof i sig.

Oplysningerne i figuren er altså langt mere detaljerede end dem som målingerne i sig selv viser.

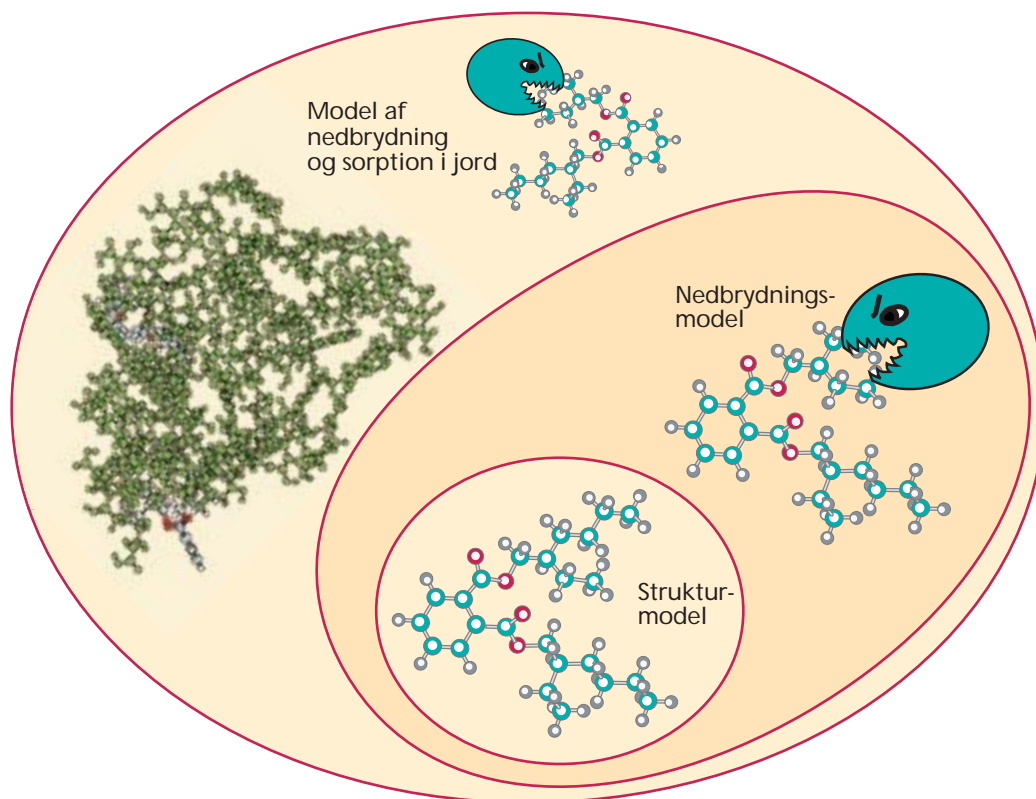
Eksemplet har vist, hvordan matematiske modeller kan bruges til at tolke data fra laboratoriet og give informationer som ikke umiddelbart er til at se. Vi har desuden fået indført nogle vigtige begreber ved miljømodeller, nemlig nedbrydning og adsorption.

Molekylets struktur bestemmer egenskaberne i miljøet

Nedbrydning og adsorption er vigtige processer for kemiske stoffer i miljøet, fordi der kan laves modeller hvor processerne indgår, der giver god overensstemmelse med målinger.

Modeller, der er lavet ved at efterligne målinger kaldes *empiriske*, og da en model pr. definition er et forsøg på at lave et billede af virkeligheden, er alle modeller empiriske.

I modellen med DBP i jord bruger vi en model (procesbeskrivelse) for nedbrydning uden egentlig at overveje andre muligheder. Det gør vi fordi modellen fungerer! Modellen for nedbrydning er imidlertid også lavet ud fra målinger, men hvor der



Modellen for nedbrydning af DEHP i jord indeholder en model for nedbrydning af DEHP, som igen indeholder en model for strukturen af DEHP.

før var DBP, bakterier, vand og jord tilstede, zoomer man i nedbrydningsmodellen ind på DBP og bakterier. Nedbrydningsmodellen bygger igen på en model for strukturen af DBP molekylet, der også er lavet ud fra målinger.

Der er altså forskellige lag af empiri. Meget overordnede modeller vil indeholde mange andre modeller, der hver især er lavet ud fra målinger.

I miljøkemiske modeller er kernen den kemiske struktur af molekylerne. Kender man antallet og typen af atomer og fordelingen af elektroner i molekylet, kan man sige noget om molekylets opførsel i miljøet. Kvantitative Struktur Aktivitets Relationer (QSAR) er modeller, der er udviklet netop til dette formål. Modellerne kan desuden forudsige opførslen af andre stoffer på baggrund af undersøgelser af kendte stoffer, hvilket er en styrke med tanke på det store antal miljøfremmede stoffer, der er i anvendelse.

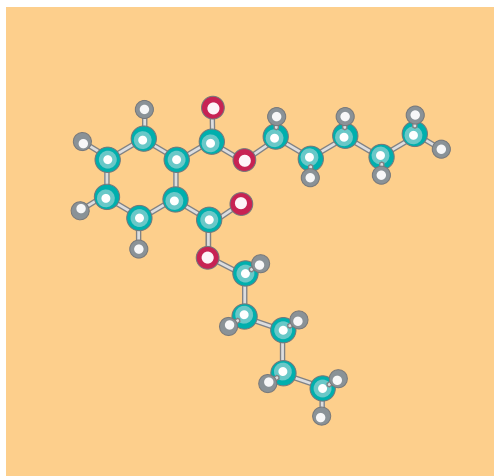
Simple målinger kan også bruges til at forstå molekylstrukturens betydning for stoffernes egenskaber. I Roskilde Rensningsanlæg har vi målt på nedbrydningen af en række phthalater, for at undersøge molekylstrukturens indflydelse på halveringstiden. Halveringstiden er den tid, der går før halvdelen af startkoncentrationen af et stof er fjernet.

Følgende stoffer er undersøgt:

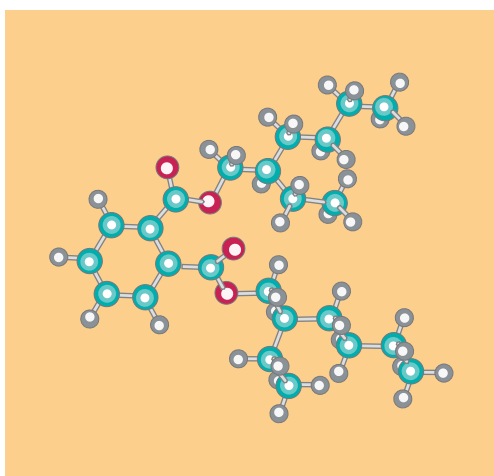
Di-n-pentyl phthalat, DPP:
8 CH₂-grupper

Di-(2ethylhexyl) phthalat, DEHP:
10 CH₂-grupper

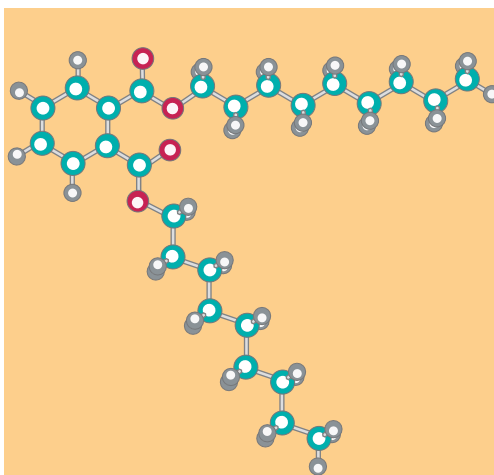
Di-n-nonyl phthalat, DnNP:
16 CH₂-grupper



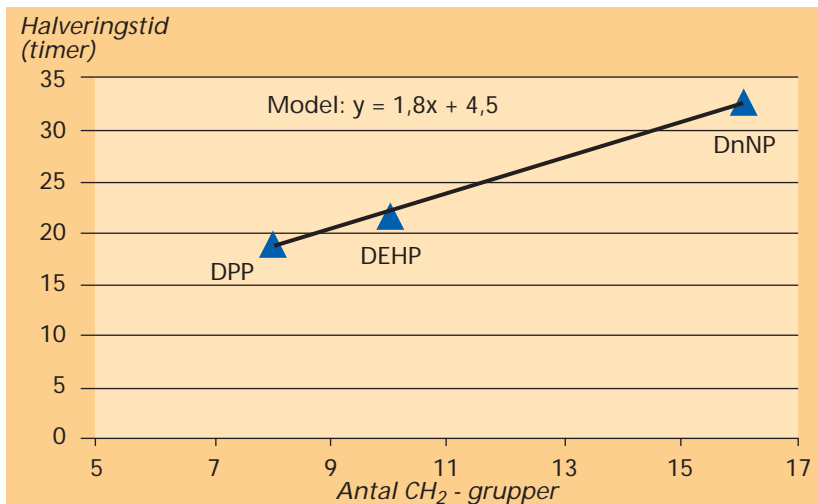
Di-n-pentyl phthalat,
DPP: 8 CH₂-grupper



Di-(2ethylhexyl) phthalat,
DEHP: 10 CH₂-grupper



Di-n-nonyl phthalat,
DnNP: 16 CH₂-grupper



Målte halveringstider (▲) for tre phthalater som funktion af antallet af CH₂-grupper. Den fuldt optrukne streg er en model lavet på baggrund af målinger i Roskilde Rensningsanlæg.



Modeller baseres på prøver der undersøges i laboratoriet.

Den karakteristiske forskel på molekylerne er antallet af CH₂-grupper. I figuren er halveringstiden vist som funktion af antallet af CH₂ grupper.

Målinger i Roskilde Rensningsanlæg giver den simple empiriske sammenhæng (model):

$$\text{Halveringstid} = 1.8 \cdot \text{antal CH}_2 \text{ grupper} + 4.5 \text{ (timer)},$$

som kan bruges til at forudsige nedbrydningen af andre phthalater ved at tælle antallet af CH₂ grupper. Modellen er meget simpel, og det kræver måling af flere stoffer, for eksempel med flere forgreninger i kæderne, for at få en model, der dækker phthalat gruppen bedre.

Roskildeområdet beskrevet i modeller

I forrige eksempel blev nedbrydning og adsorption anvendt til at beskrive fjernelser af DBP i et laboratorieforsøg, og nu vil vi bruge dem til at beskrive forekomsten af tre stoffer i det virkelige miljø.

Vi vil se på Di-(2ethylhexyl)-phthalat (DEHP), der primært anvendes som blødgører i PVC-produkter, og 2 overfladeaktive stoffer der forekommer i vaske- og rensningsmidler, nemlig Lineær Alkylbenzen Sulfonat (LAS) og Nonylphenol (NP). DEHP er blandt andet mistænkt for at være kræftfremkaldende, NP giver østrogen lignende effekter og LAS er giftigt overfor vandlevende organismer.

Det virkelige miljø er Roskilde by og omegn. Hovedkilderne til de tre stoffer er industrier og husholdninger i Roskilde by, og den væsentligste transportvej for stofferne er gennem spildevandssystemet, hvor alt spildevand fra området ledes til rensningsanlægget Bjergmarken. Herfra ledes det ren-



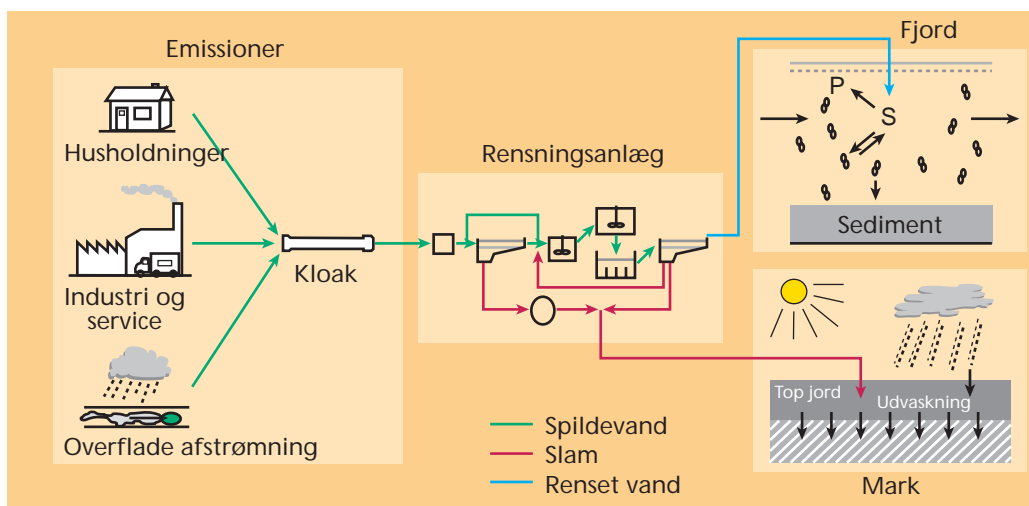
Foto: Befoto/Dieter Feitz

sede vand ud i fjorden, i den del der kaldes Roskilde Vig, og råslammet, der hovedsagelig er dannet i rensningsanlægget, bliver opbevaret på en mark i nærheden af fjorden.

Roskilde området indeholder matricerne jord, vand og sediment, og formålet med en model er at beregne forekomsten i hver af matricerne, da de hver især har specielle egenskaber i forbindelse med stoffernes fjernelse fra miljøet.

Roskilde centrum.

Stoffernes bevægelse kan beskrives ved at inddele Roskildeområdet i fire modeller som beskriver henholdsvis emissioner, rensningsanlæg, fjord og landbrugsjord.



På figuren er kilder, rensningsanlæg, fjord og mark skitseret, og undersøger man disse fire dele, vil man få et godt billede af, hvad der sker med stofferne undervejs i et typisk dansk samfund.

En beskrivelse af stoffernes forekomst i Roskilde området kan altså bestå af fire modeller:

- Model 1:** Udsendelse fra kilder.
- Model 2:** Forekomst af stoffer i udløbet fra Roskilde rensningsanlæg.
- Model 3:** Forekomst af stoffer i Roskilde fjord (vand og sediment).
- Model 4:** Forekomst af stoffer i slamgødsket jord.

Rensningsanlægget er et knudepunkt for indsamling af stof fra området og videre fordeling til fjord og mark. Vil vi vise resultaterne for model 2, der beregner forekomsten i udløbet i det rensede vand og produceret råslam, idet forekomsten i indløbet forudsættes kendt fra model 1 (udsendelse fra kilder).

For at bestemme bakteriernes nedbrydning af stofferne i anlægget og stoffernes adsorption til slammet, er det nødvendigt at måle

koncentrationerne i indløbet og udløbet fra rensningsanlægget.

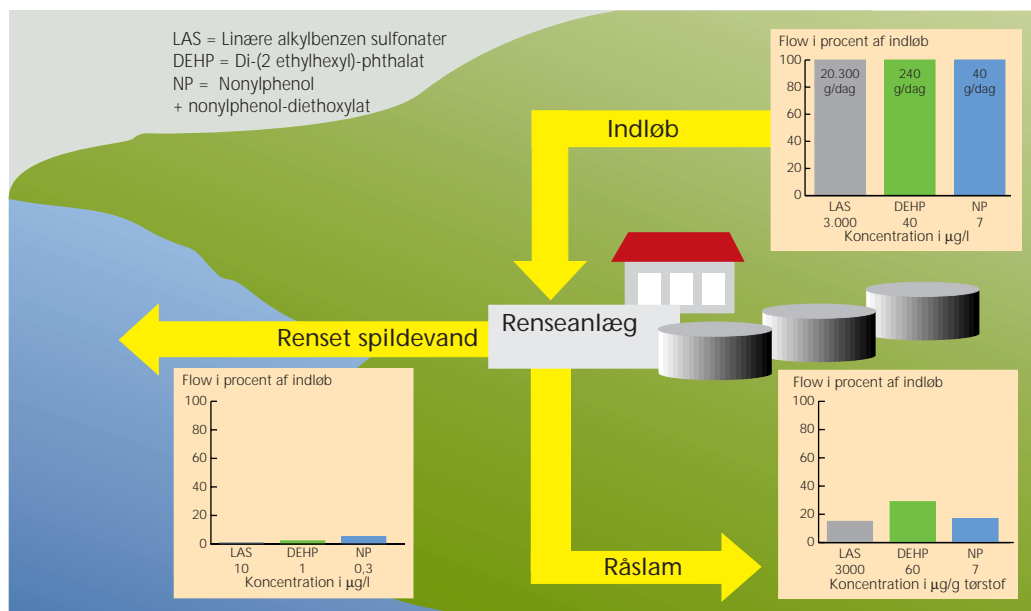
Ligesom for laboratorieforsøget med DBP skal modellen kalibreres, så den efterligner de målte værdier. Og det er netop nedbrydningshastigheden og adsorptionskonstanten, der findes af denne kalibrering. Når de er fundet og de matematiske ligninger er opstillede, kan vi beregne forekomsten i udløbet og i slammet på baggrund af vilkårlige koncentrationer i indløbet.

I indløbet er der målt følgende mængder af stofferne, jvf. figuren øverst næste side:

LAS: 20.300 g LAS pr. dag.
 DEHP: 240 g DEHP pr. dag.
 NP: 40 g NP pr. dag.

Modelberegningerne viser, at rensningsanlægget er effektivt til fjernelse af de tre stofgrupper. Mellem 85 og over 99 % af stofferne fra indløbet fjernes. Det meste nedbrydes og kun mellem 15 og 35 % af det tilførte kan genfindes i råslammet. Men er det godt nok?

Miljøstyrelsen valgte i 1997 at indføre grænseværdier for miljøfremmede stoffer



Beregnete stofmængder i indløb, udløb og råslam fra Roskilde Rensningsanlæg. Beregningerne er baseret på målinger i indløb og udløb. Modellerne giver mange informationer ud fra få målte koncentrationer.

i slam, med det formål at nedbringe forekomsten i miljøet. For at vurdere om grænseværdierne bliver overholdt, har rensningsanlæggene siden 1997 haft pligt til at måle koncentrationerne af blandt andet LAS, DEHP og NP i deres slam. I tabellen nederst på siden er de beregnede koncentrationer i råslammet fra model 2 vist sammen med grænseværdierne.

DEHP og NP opfylder stort set kravene, mens LAS ligger et stykke over. Af modelresultaterne har vi altså fundet et muligt problem i forbindelse med LAS koncentrationen i slammet. Det skal dog nævnes, at beregningerne gælder for råslammet, der videre skal udrådnes og lagres. Ved lagringen er der god mulighed for yderligere nedbringning af LAS koncentrationen. Det færdigbehandlede slam er der ikke målt eller beregnet på.



Foto: Bioto/Johnny Madsen

Slam fra rensningsanlæg skal overholde grænseværdier for det må anvendes i f.eks. landbruget.

Koncentrationerne i det rensede vand er:

- LAS: 10 µg pr. liter.
- DEHP: 1 µg pr. liter.
- NP: 0.3 µg pr. liter.

	LAS	DEHP	NP
Beregnet i råslam fra Roskilde rensningsanlæg	3000	60	7
Grænseværdi fra 1997	2600	100	50
Grænseværdi fra 2000	1300	50	10

Grænseværdier for LAS, DEHP og NP i spildevandsslam. Alle tal er i mg pr. kg. tørstof.

Miljømodeller

Bjergmarken rensningsanlæg i Roskilde.
Øverst ses to forklaringsstanke.
I midten de biologiske tanke og
nederst efterklaringsstankene.

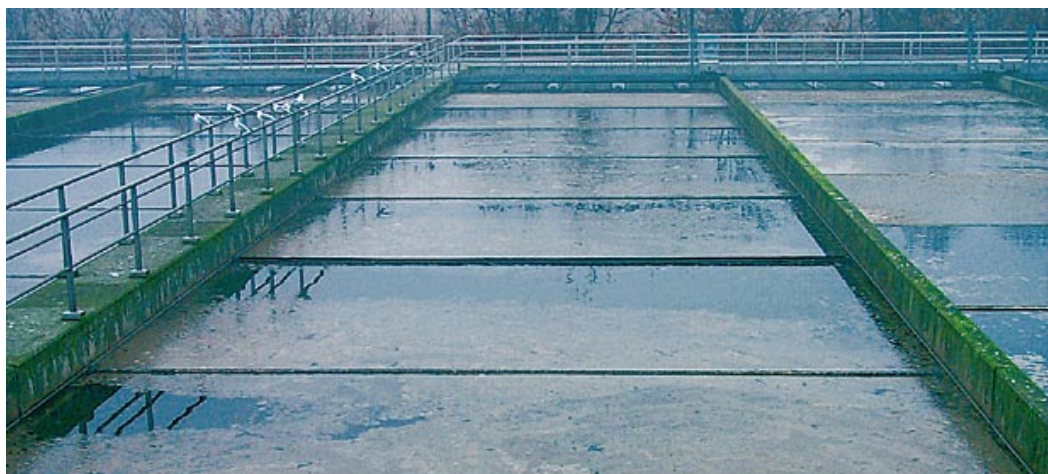


Foto: DNU/Parik Fauser

Koncentrationerne er lave, men det kræver en undersøgelse af fjorden for at finde ud af, om mængderne vil give problemer eller ej.

DEHP i Roskilde Fjord

Hvad sker der med den mængde DEHP, der ledes fra Roskilde rensningsanlæg ud i fjorden? Er det rensede vand så rent, at det ikke har nogen betydning for forekomsten i fjorden, eller vil en forbedring af rensningsanlæggets effektivitet være nødvendig for at sikre en tilfredsstillende tilstand i fjorden? For at besvare spørgsmålet vil vi lave en model, der kan beregne forekomsten af DEHP i fjorden.

Hvis fjorden skal laves så "virkelig" som muligt, skal breddens og vanddybdens variationer medregnes, ligesom planter og dyr vil have en indflydelse på DEHP's forekomst. Temperaturen, nedbøren og solindstrålingen er måske vigtige og de udledninger, som mennesker tilfører fjorden på anden vis, bør medregnes. Men hvor er vi nu henne? Vi er ved at lave virkeligheden og ikke en model af den. Vi må bruge vores viden, erfaring og sunde fornuft til at begrænse modellen, til kun at indeholde det vigtigste for besvarelsen af vores spørgsmål.

Det ses af kortet, at fjorden består af områder der er brede, andre der er smalle og nogle steder med små forgreninger. Vi vil lave fire modeller, som er forskellige med hensyn til hvor detaljeret de beskriver udformningen af fjorden og bevægelsen af stof. På baggrund af målinger i fjordvandet vil vi efterfølgende, når alle resultater er fundet, vurdere hvilken af modellerne, der er den bedste.

Til at begynde med laver vi hele Roskilde Fjord om til en kasse med lige lange kanter, og en vanddybde, der svarer til fjordens middeldybde. Hvis et stof er flygtigt, det



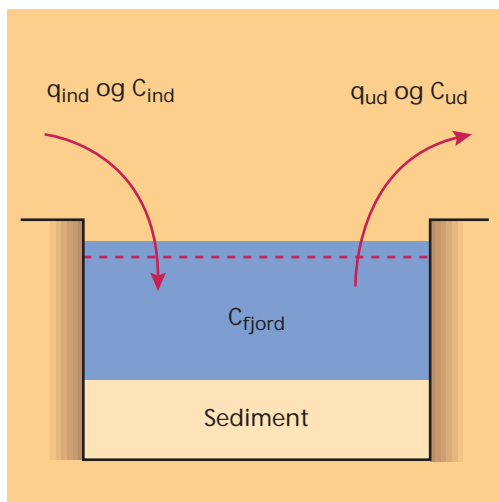
vil sige at det er meget tilbøjeligt til at fordampe fra vandets overflade og forsvinde op i luften, er det vigtigt at fjordens overfladeareal er med i modellen. Når overfladeareal og middeldybde er kendte, vil kantlængderne være givet:

Middeldybde: 3 m.
 Overfladeareal: 125 km²
 Kantlængder: $\sqrt{125 \text{ km}^2} = 11,2 \text{ km}$.

Vi har nogle systemgrænser, der består af bunden nedadtil og til siderne og af luften opadtil. Koncentrationen af DEHP i vandet

Kort over Roskilde Fjord og opland.

Kassemodel af Roskilde fjord. DEHP koncentrationerne i vand og sediment beregnes ud fra hvad der kommer ind i fjorden, ud til omgivelserne, samt hvad der sker med stoffet i fjorden. Kassemodellen bruges til model A, B og C



inden for disse grænser vil være bestemt af, hvad der føres udefra og ind, indefra og ud, samt hvad der sker med DEHP i vandet i fjorden. Det vil sige af følgende 3 mekanismer:

- 1 *Stoftransport udefra og ind i systemet* gennem systemgrænserne som nedbør, tilførsel fra vandløb og søer samt tilførsel fra rensningsanlæg.
- 2 *Stoftransport indefra og ud til omgivelserne* gennem systemgrænserne, for eksempel som fordampning fra vandet til den omgivende luft og fraførsel til søer og åer og det omgivende hav.
- 3 *Processer inde i systemet* der fjerner, danner eller lagrer stof. Nedbrydning, adsorption og sedimentation (se senere).

Den mængde DEHP, der strømmer ind i fjorden pr. døgn kan skrives som $q_{ind} \cdot C_{ind}$ og den mængde, der strømmer ud af fjorden er $q_{ud} \cdot C_{ud}$, hvor q 'erne er mængde vand pr. døgn, og C 'erne er DEHP koncentrationerne i vandet.

Model A:

Til at begynde med skønner vi, at tidevandet ikke betyder noget, hvilket betyder, at

der ikke strømmer havvand ind i fjorden, og at den mængde ferskvand, der tilføres fjorden fra nedbør, søer og åer, løber ud i havet eller fordampes.

DBP og DEHP stammer fra samme stofgruppe, nemlig phthalaterne, og det er derfor en god antagelse, at de processer som er betydende for DBP, også er det for DEHP. Som et første gæt på en model af DEHP i Roskilde Fjord antager vi dog, at det kun er nedbrydningen der er af betydning.

Inden vi kan beregne koncentrationen af DEHP i fjordvandet (C_{fjord}), er der nogle helt fundamentelle overvejelser, vi skal gøre os omkring, hvordan DEHP fordeler sig i fjorden. Et spørgsmål, der kan være afgørende, når man skal udtage prøver og modellere systemer i naturen er, om koncentrationen af DEHP er ens i hele fjorden.

Vinden, tidevandet og tilløb fra vandløb og søer vil røre grundigt om i fjordens vand. Hvis omrøringen er kraftig i forhold til fjordens (modelkassens) størrelse og nedbrydningen af DEHP desuden er beskedent, vil en udledning af DEHP i den ene ende af fjorden relativt hurtigt, måske efter én dag, kunne spredes til den anden ende af fjorden. Den samme DEHP koncentration vil hurtigt forekomme i hele fjorden, og ved at tage én enkelt prøve på et vilkårligt sted, vil man kunne beskrive forholdene i hele fjorden.

Fjorden siges at være fuldstændigt opblandet, og en model til bestemmelse af koncentrationen er simpel at stille op. Den vil bestå af et DEHP regnskab, også kaldet en *massebalance*, der indeholder de tre ovennævnte mekanismer. Af denne massebalance kan forekomsten af DEHP bestemmes, idet C_{fjord} er lig med C_{ud} .

I boks 3 er beregningerne for de tre første modeller samlet.

Boks 3 Massebalancer

Model A (kassemodel, nedbrydning, ferskvand):

masse ind – masse ud = nedbrudt \Rightarrow

$$C_{\text{ind}} \cdot q_{\text{ind}} - C_{\text{ud}} \cdot q_{\text{ud,fersk}} = k_{\text{ned}} \cdot V \cdot C_{\text{ud}} \Rightarrow \quad (13)$$

$$C_{\text{ud}} = \frac{C_{\text{ind}} \cdot q_{\text{ind}}}{(k_{\text{ned}} \cdot V + q_{\text{ud,fersk}})} = \frac{214\text{g}}{(648 + 615) \cdot 10^3 \text{ m}^3} = 170 \text{ ng DEHP pr. liter}$$

Model B (kassemodel, nedbrydning, ferskvand, saltvand):

masse ind – masse ud = nedbrudt + saltvand ud \Rightarrow

$$C_{\text{ind}} \cdot q_{\text{ind}} - C_{\text{ud}} \cdot (q_{\text{ud,fersk}} + q_{\text{ud,salt}}) = k_{\text{ned}} \cdot V \cdot C_{\text{ud}} \Rightarrow \quad (14)$$

$$C_{\text{ud}} = \frac{C_{\text{ind}} \cdot q_{\text{ind}}}{(k_{\text{ned}} \cdot V + q_{\text{ud,fersk}} + q_{\text{ud,salt}})} = \frac{214\text{g}}{(648 + 615 + 17712) \cdot 10^3 \text{ m}^3} = 11 \text{ ng DEHP pr. liter}$$

Model C (kassemodel, nedbrydning, ferskvand, saltvand, sedimentation):

masse ind – masse ud = nedbrudt + saltvand ud + sedimenteret \Rightarrow

$$C_{\text{ind}} \cdot q_{\text{ind}} - C_{\text{ud}} \cdot (q_{\text{ud,fersk}} + q_{\text{ud,salt}}) = k_{\text{ned}} \cdot V \cdot C_{\text{ud}} + S \cdot K_d \cdot C_{\text{ud}} \Rightarrow \quad (15)$$

$$C_{\text{ud}} = \frac{C_{\text{ind}} \cdot q_{\text{ind}}}{(k_{\text{ned}} \cdot V + q_{\text{ud,fersk}} + q_{\text{ud,salt}} + S \cdot K_d)} = \frac{214\text{g}}{(648 + 615 + 17712 + 17100) \cdot 10^3 \text{ m}^3} = 6 \text{ ng DEHP pr. liter}$$

Hvor k_{ned} er første ordens nedbrydningshastighedskonstanten, V er vandvolumenet af fjorden, K_d er fordelingskoefficienten og S er sedimentationshastigheden af partikler i fjorden.

Værdier for C_{ind} , q_{ind} , $q_{\text{ud,fersk}}$, $q_{\text{ud,salt}}$, k_{ned} , V , S og K_d er fundet ud fra målinger foretaget af DMU, Frederiksborg amt og ud fra modelkalibrering.

En vigtig forudsætning for massebalancerne er, at koncentrationerne er konstante og ikke ændrer sig i tiden. Hvorvidt det er en rigtig antagelse vil blive diskuteret i boks 5.

Koncentrationen af DEHP i fjordvandet for den simple model A, er 170 ng DEHP pr. liter.

Model B:

I første omgang forudsatte vi, at tidevandet ikke betød noget for DEHP koncentrationen i fjorden. Det faktum, at vandet i Roskilde Fjord er rimeligt salt må imidlertid betyde, at der jævnlige tilføres havvand til fjorden. Fjorden ville efterhånden ellers blive til en ferskvandssø, hvis der kun blev tilført ferskvand.

Der kan derfor opstilles en ny model, der beskriver en saltvandsindstrømning, $q_{ud,salt}$ der fører vand uden DEHP ind i fjorden, og samtidig fører den overskydende vandmængde ud igen samme vej, men denne gang med DEHP.

Fjordkoncentrationen i model B, bliver:

$$C_{ud} = 11 \text{ ng DEHP pr. liter}$$

Der skete noget! Det var ventet, at koncentrationen ville falde, men det var svært at vurdere på forhånd, at faldet ville blive så stort.

Model C:

Phthalaterne har stor tilbøjelighed til at binde sig til faste overflader (adsorbere), og en oplagt forbedring af modellen kunne være at indregne adsorptionen af DEHP til partikler i vandet.

Målinger i fjorden viser, at der dannes et lag sediment på 2.5 mm i løbet af ét år. Den mængde partikler, der giver anledning til dette løft, vil have en mængde DEHP bundet til sig, svarende til $K_d \cdot C_{ud}$. Der fjernes på denne måde løbende DEHP fra vandet over til partikler og ned til sedimentet.

Koncentrationen i model C, bliver:

$$C_{ud} = 6 \text{ ng DEHP pr. liter}$$

Model D:

Indtil videre har vi ændret på processer og vandudvekslingsforhold, men fastholdt den meget simple boks struktur af fjorden. I den sidste model vil vi ændre fjordudseendet for at få en bedre overensstemmelse med den virkelige form.

Bjergmarken rensningsanlæg, der modtager spildevand fra hele Roskilde Kommune, udleder det rensede vand til Roskilde Vig og man kan forestille sig, at det vil være hensigtsmæssigt at adskille Vig'en fra den øvrige fjord, da forekomsten af DEHP måske er højere i Vig'en. Derudover vil vi inddele fjorden i områder, der hver især er forskellige med hensyn til omrøring og fordeling af DEHP i vandet. Roskilde Vig og Bredning tilnærmes begge med fuldstændigt opblandede dele, mens strømningsforholdene i det smalle afsnit er noget anderledes, se boks 4.

Den smukke Roskilde Fjord til venstre på figuren bliver set med en modellørs briller og ændret til det triste syn til højre.

For hver af de tre dele opstilles en massebalance, der samlet beskriver hele fjorden. Når modellen beregner, vil massebalancerne løbende give informationer til hinanden. For Vig'en og Bredning'en bliver resultatet:

$$C_{vig} = 32 \text{ ng DEHP pr. liter}$$

$$C_{bredning} = 26 \text{ ng DEHP pr. liter}$$

For den smalle del fås en koncentration for hver inddeling, hvilket ender med koncentrationsprofilen på den nederste figur s. 31.

Fire forskellige modeller til bestemmelse af DEHP koncentrationen i Roskilde Fjord er opstillet. Opgaven er nu at vurdere hvilken model vi skal vælge som den bedste.

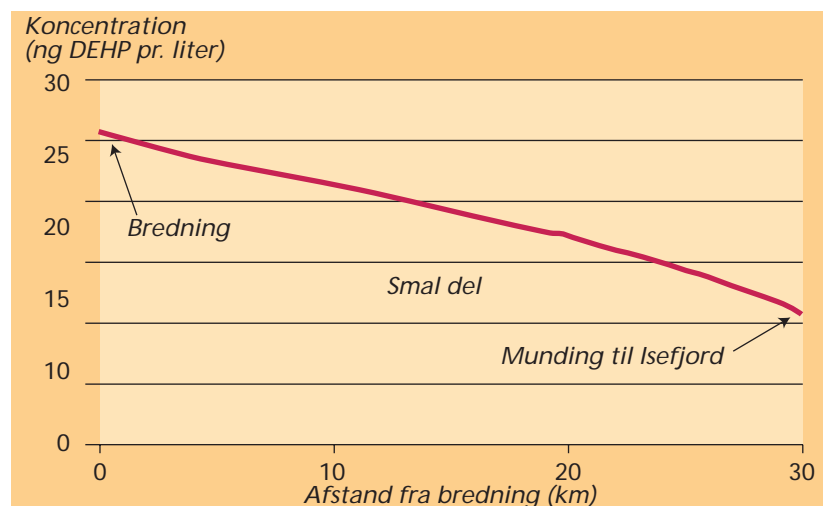
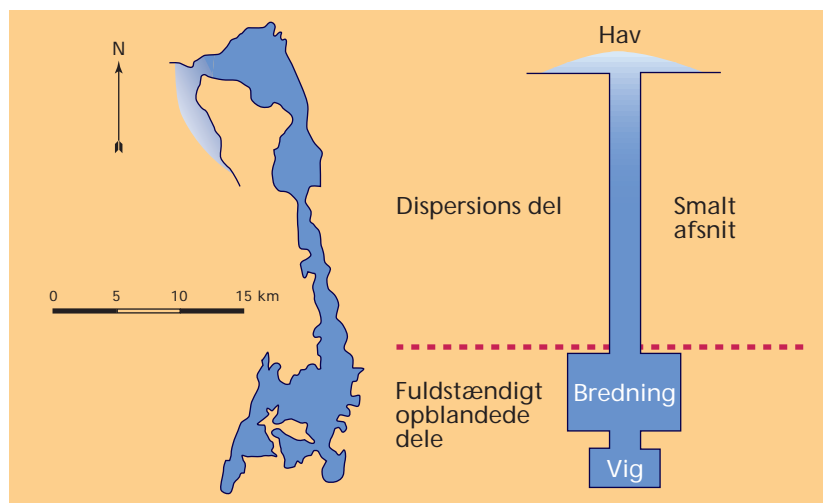
Den bedste model kan være bestemt ved, at *modelfejlen* mellem modelresultatet og den eksakte værdi er så lille som mulig. Men hvad er en eksakt værdi? Man kan antage, at den eksakte værdi svarer til en målt værdi, men den vil givetvis også indeholde fejl, og det kan være svært at vurdere, om fejlen er mindre eller større end fejlen fra model beregningerne. Eller også kan man opstille flere modeller af varierende detaljeringsgrad, ligesom vi har gjort, og antage, at den mest detaljerede model er den mest rigtige.

Der er taget prøver af fjordvandet flere forskellige steder i fjorden. De er tilnærmelsesvis konstante, og viser ikke et fald svarende til beregningerne i model D. Det kan skyldes tilfældige vindpåvirkninger, eller at tidevandsstrømningen ikke var ens, når prøverne blev taget. For at undgå overfortolkninger vil vi bruge den målte middelværdi på 90 ng DEHP pr. liter som et bud på den eksakte værdi.

Modelfejlen kan deles op i en *strukturfejl* og en *parameterfejl*.

Strukturfejlen kan beregnes som forskellen mellem det eksakte resultat og modelresultatet. Den opstår, fordi enhver model er et forenklet billede af virkeligheden. De matematiske udtryk, der indgår i beregningerne, er tilnærmelser til virkelige processer, og fejlen, der begås ved at anvende modellen, skyldes enten at vigtige processer udelades, eller at forkerte procesbeskrivelser anvendes, fordi man ikke kender virkeligheden tilstrækkeligt godt.

Strukturfejlen er størst for simple modeller, fordi de mangler informationer fra ude-



Den øverste figur til venstre viser den virkelige udformning af Roskilde Fjord og til højre udformningen som er brugt i model D.

Den nederste figur viser den beregnede DEHP koncentrationer i den smalle del af Roskilde Fjord, hvor der regnes med dispersion (se boks 4).

ladte processer. Efterhånden som en bedre beskrivelse bruges ved at indføre nye processer, bliver strukturfejlen mindre, indtil den utopiske situation opstår, hvor virkeligheden er fundet og strukturfejlen er nul.

Boks 4

Dispersion

I det smalle afsnit af fjorden vil en koncentrations værdi i den ene ende ikke umiddelbart kunne genfindes i den anden ende. Den tilfældige omrøring har ikke samme betydning som den mere ensrettede strømning fra tidevandet, der to gange i døgnet driver vandet ind og ud fra fjorden til havet med stor hastighed. DEHP bevægelsen vil altså først og fremmest følge tidevandsstrømmen, og er nedbrydningen og/eller sedimentationen desuden stor, vil DEHP fjernes inden det når at spredes til den anden ende.

Koncentrationen i den smalle del er ikke den samme alle steder, og man vil ikke kunne tage én enkelt prøve, der vil være repræsentativ for koncentrationen i hele delen. Antagelsen om fuldstændig opblanding gælder altså ikke her, og en simpel model til løsning af problemet analogt til det fuldstændig opblandede system er ikke umiddelbart mulig.

Inddeles den smalle del imidlertid i to lige store dele, vil de respektive koncentrationsvariationer i de to dele være mindre end for hele afsnittet. For hver videre inddeling bliver variationerne i den enkelte del mindre og mindre for til sidst at blive ubetydelig (umålelig). I den situation har vi lavet en model af den smalle del bestående af et antal dele med tilnærmelsesvis konstante koncentrationer, det vil sige et system af fuldstændigt opblandede dele.

For hver enkelt fuldstændigt opblandet del kan der opstilles en massebalance svarende til ligning 15, blot skal der nu tages højde for transporten af stof mellem de forskellige dele. Koncentrationen vil være afhængig af stedet i den smalle del. Den smalle del vil fra bredningen til munden ved Isefjorden blive inddelt i steds-kridt, og koncentrationspro-

filet vil indeholde et spring for hvert steds-kridt, se figurerne næste side. Steds-kridtene skal være så små, at koncentrations-springet i den enkelte del er ubetydeligt lille, men samtidig skal der ikke være unødvendig mange inddelinger, da beregningstiden for et stort system kan blive uhensigtsmæssigt stor. At finde det optimale antal inddelinger til et system er en væsentlig opgave indenfor modellering af naturlige systemer.

Følgende massebalance kan opskrives for hvert enkelt fuldstændigt opblandet del:

$$C_{ind} \cdot q_{ind} - C_{ud} \cdot q_{ud} = k_{ned} \cdot V \cdot C_{ud} + S \cdot K_d \cdot C_{ud} + \frac{dT}{dx} \cdot dx \cdot y \cdot z \quad (16)$$

Det nye i massebalancen er det sidste led, der udtrykker transporten i den smalle del, der skyldes tidevandets puls, ferskvandstilstrømningen og vinden.

Fick publicerede i 1855 en ligning, der kan beskrive molekylers transport forårsaget af deres tilfældige bevægelser. Denne ligning gælder for molekylers bevægelse, men kan i lige så høj grad bruges under større strømningsforhold, svarende til den smalle del af fjorden.

$$T = -D \cdot \frac{dC}{dx} \quad (17)$$

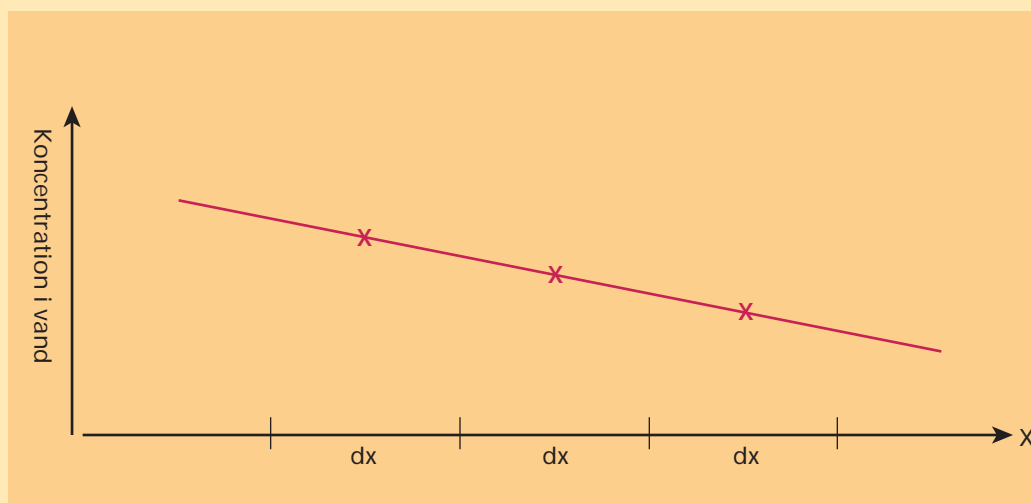
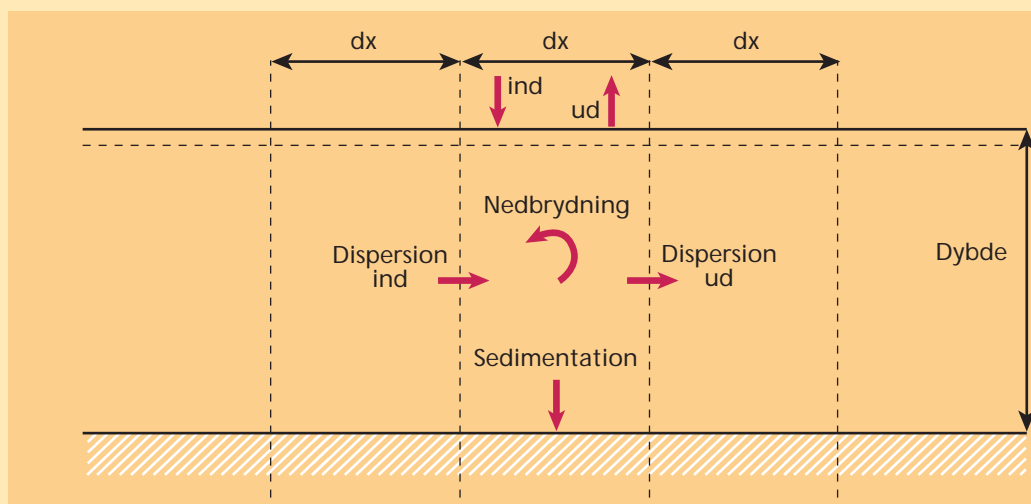
D kaldes for dispersionskoefficienten, og kan bestemmes af koncentrationsfordelingen af stoffet, for eksempel ved målinger, og af ferskvandtilstrømningen. For Roskilde fjord kan man regne med en dispersionskoefficient på ca. 30 m² pr. sekund.

Det er interessant at nævne, at dispersionen er afhængig af størrelsen af koncentrationsændringen, $\frac{dC}{dx}$. Har man et stort fald mellem to dele, vil transporten ligeledes være stor, og minuset bevirker, at transporten fører stof fra den høje koncentration mod den lave.

Et vilkårligt system vil i princippet kunne laves som et antal fuldstændigt opblandede dele. To ydertilfælde kan forekomme, det første er én enkelt fuldstændigt opblandet kasse, og det andet er, når der inddeles i

”uendeligt” mange dele med en meget lille tykkelse dx . Den sidstnævnte situation kaldes for direkte gennemstrømning.

En model af et virkeligt system vil typisk bestå af et antal dele mellem disse to ydertilfælde. Jo flere inddelinger der er, desto længere vil en modelberegning naturligvis tage. Er systemet stort kan det derfor betale sig at optimere modellen, så det mindste antal dele anvendes.



Den øverste figur viser hvordan man kan inndele et område med stor gennemstrømning, som den smalle del af Roskilde Fjord, i et antal fuldstændigt opblandede dele. For hver del kan der opstilles en massebalance for det pågældende stof, som beskrevet i ligning 16, hvoraf der kan beregnes en stofkoncentration.

I nederste figur er koncentrationsforløbet vist for et udsnit af den smalle del.

Det er givet, at en model, der indeholder flere processer, vil tilnærme virkeligheden mere korrekt. Men samtidig vil flere processer inddrage flere parametre, der alle vil være mere eller mindre præcist kendte. Modeller, der bruger disse parametre, vil føre unøjagtighederne med sig, og jo flere parametre der anvendes, desto større bliver modellens parameterfejl.

Der er altså et dilemma der skal løses: Hvor detaljeret en model kan vi tillade os at lave, før parameterfejlen overstiger strukturfejlen? Parameterunøjagtigheder kræver imidlertid en gennemgang af fejlfordelingsfunktioner og andre statistiske begreber, og vi vil derfor alene koncentrere os om modelresultaternes afvigelser fra den målte værdi.

På trods af, at modellerne er meget simple, og at der er unøjagtigheder knyttet til den målte værdi, er overensstemmelsen mellem de beregnede og den målte middelkoncentration god. En fejl på under 100 % er tilfredsstillende, når man modellerer så komplekse systemer som Roskilde Fjord. Hvis modellerne skal bruges som risikovurderingsværktøj, er det imidlertid vigtigt at påpege denne fejl og korrigerer modelresultaterne på passende måde.

Hvis vi ser på kassemodellerne A, B og C, kan man sige, at den første og mest simple model, uden saltvandtilstrømning fra havet og uden sedimentation til bunden, er lige så god som de andre, se tabellen.

Men vi ved at saltvandsindstrømningen er væsentlig i fjorden, da saltkoncentrationen er høj, og at udelade den vil være direkte fejlagtigt. Derfor vil vi forkaste den første model og i stedet fokusere på de andre tre.

Den sidste model er lavet ud fra den antagelse, at fremfor at tilføje yderligere processer, vælger vi at forfine udformningen af fjorden (strukturen af modellen), så vi inddeler den i afsnit, der er forskellige med hensyn til nogle vigtige egenskaber. Først og fremmest kan vi se direkte af fjordens udformning, at der vil være områder med stor gennemstrømning og områder med mere fuldstændig opblanding. Desuden er DEHP tilførslerne til de forskellige områder forskellige, og disse områder bør derfor adskilles.

Fejlen er også den mindste af de fire modeller, og vi vælger derfor at tro, at det er vores bedste bud på en simpel model, der beskriver DEHP koncentrationen i Roskilde Fjord.

	A: Kasse model Nedbr. Ferskv.	B: Kasse model Nedbr. Ferskv. + saltv.	C: Kasse model Nedbr. + sediment. Ferskv. + saltv.	D: Opdelt model Nedbr. + sediment. Ferskv. + saltv.
Beregnet koncentration (a)	170	11	6	32 (Vig) 26 (Bredning)
Fejl = (a - målt) ----- • 100% målt	89 %	88 %	93 %	64 % (Vig) 71 % (Bredning)

Beregnete og målt værdi for vandkoncentrationen af DEHP i Roskilde fjord. Koncentrationer i ng pr. liter

Boks 5

Tidens indflydelse

I vores eksempel med DEHP i Roskilde Fjord forudsatte vi, at koncentrationen var konstant. Det skyldes, at konstante forhold er langt lettere at regne på, end hvis koncentrationen ændrer sig med tiden (dynamiske forhold). Når dynamiske forhold skal beskrives, anvendes der differentialligninger, der gør matematikken mere kompliceret. Men hvornår kan man tillade sig at forudsætte konstante forhold?

For at undersøge dette på en nem måde kan man beregne en slags levetid for et molekyle i det system man beskriver. Når det gælder Roskilde Fjord er den beregnede koncentration i vandet omkring 25 ng DEHP pr. liter ifølge den sidste model, hvilket svarer til, at der er omkring 10 kg DEHP i fjordvandet, da fjorden indeholder omkring 0.4 km³ vand. Den mængde DEHP, der bliver tilført i løbet af en enkelt dag, svarer til ca. 200 g DEHP pr. dag.

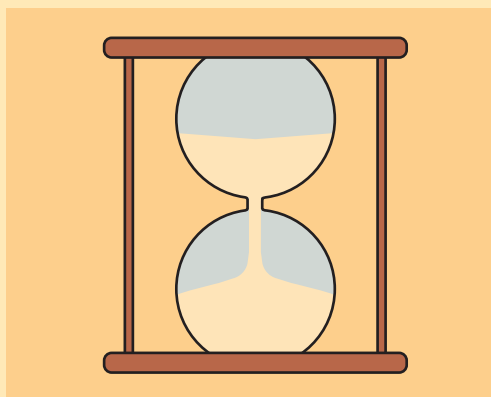
Et godt mål for hvor lang levetid et molekyle har i fjordvandet vil simpelthen være den tid, det tager at tilføre den mængde stof, der allerede er i fjorden. Altså i dette tilfælde vil det tage ca. 50 dage at fylde 10 kg DEHP i fjorden, når der tilføres 200 g pr. dag. Under konstante forhold vil et molekyle altså i gennemsnit opholde sig i fjorden i 50 dage. Nogle molekyler vil selvfølgelig være der i længere tid, mens andre vil være der i kortere tid, men den gennemsnitlige levetid vil være omkring 50 dage.

Molekylernes gennemsnitlige levetid i et system betegnes ofte som middel opholdstiden, som er et meget vigtigt tal, når det skal vurderes, om der hersker konstante forhold eller ej. Dette kan igen illustreres med fjordeksemplet: Kilderne til DEHP kommer overvejende fra plastik, og har eksisteret i mange

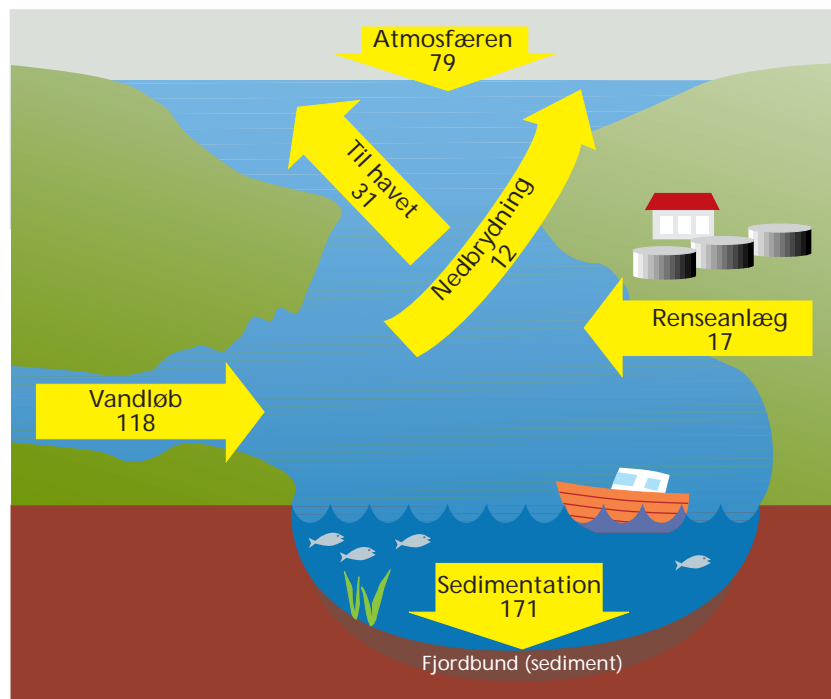
årtier, så fjorden har været påvirket af stoffet gennem lang tid. Sammenlignes denne lange påvirkningstid med en middel opholdstid på 50 dage, kan det let ses, at forholdene må være tilnærmelsesvis konstante i fjorden.

Der kan dog være nogle udsving hen over året, som kan true forudsætningen om en konstant koncentration. For eksempel kan der om foråret komme en opblomstring af svævealger, der sedimenterer ned til bunden i løbet af sommeren. Disse kan trække ekstra meget stof ned til bunden, simpelthen fordi stoffet sætter sig fast til algerne, men set over et år vil koncentrationen være stabil.

For tilfældet med Roskilde Fjord er det altså en rimelig antagelse at regne med konstante koncentrationsforhold. I andre systemer, hvor der for eksempel indgår stoffer med lille stoffjernelse og med tilløbssvingninger, der svarer til opholdstiden, vil det ofte være nødvendigt at regne med en tidsmæssig afhængighed, og så slipper man nok ikke uden om differentialligningerne.



Tidsforløbet skal med i model-
lerne.



Målinger og beregninger ved model D beskriver hvordan DEHP bevæger sig i og omkring Roskilde Fjord. Pilene angiver DEHP pr. dag.

Ud over at give et bud på DEHP forekomsten i fjordvandet, giver modellen os mange andre informationer, fordi mekanismerne i massebalancerne nu har fået tal på. På figuren er tallene brugt til at vise, hvordan DEHP strømmer til og fra fjordvandet.

Det er vigtigt at konstatere, at DEHP koncentrationen i fjordvandet er meget lav. 90 ng pr. liter er nede i et område, hvor der ikke kan påvises biologiske effekter på planter og dyr.

Man kan undre sig over, at kilder som vandløb og luften bidrager mest til DEHP forekomsten. Omvendt kan vi glæde os over, at Roskilde rensningsanlæg renser spildevandet så godt, at bidraget til fjorden er lille.

Nedbrydning af miljøfremmede stoffer er en følsom proces, fordi koncentrationerne er meget lave, og der kræves mikroorganismer, der er egnede til at kunne fordøje stof-

ferne. Er der perioder hvor, stofferne ikke er der, kan mikroorganismene forsvinde. Er koncentrationen meget lav, skal de have supplerende kost. Nedbrydningen er derfor ikke den vigtigste fjernelse af DEHP i fjordvandet. Sedimentationen er klart dominerende efterfulgt af havudvekslingen.

En vigtig ting ved massebalancen skal nævnes. Nedbrydningen fjerner DEHP *helt*, det vil sige, at DEHP molekylerne ødelægges og forsvinder ud af systemet. Men hvad sker der med det stof, der falder ned på fjordbunden? Det er faktisk her, at situationen kan blive kritisk. DEHP er så stærkt bundet til sedimentpartiklerne, at det har svært ved at bevæge sig ud af stedet og så længe det er bundet, kan det ikke fjernes ved nedbrydning. Ikke desto mindre vil der ske en langsom frigivelse fra partiklerne, og den efterfølgende nedbrydning vil sørge for, at koncentrationen i sedimentet ikke stiger. Forudsætningen er imidlertid, at tilførslen ikke stiger, for gør den det, vil sedimentkoncentrationen sandsynligvis også vokse.

Fjordmodellen viser, at man ved at samle og vurdere sin viden omkring det aktuelle stofs og systems egenskaber kan lave en model, der er relativt simpel, på trods af kompleksiteten af systemet. Fordelen ved en simpel model er, at det er nemmere at tolke modellens "følsomhed" overfor ændringer. Det kan være et nyt stof, der ledes ud i området eller en ændret vandtilførsel.

Eksemplet viser, at modellen kan bruges meget specifikt til at finde DEHP forekomsten i vandet, og mere bredt og oversigtsmæssigt til at få en forståelse for DEHP cirkulationen i et så komplekst system som Roskilde området.

Opsummering af fremgangsmåde

De viste eksempler på modeller i miljøkemi er i princippet opbygget på samme måde, da der er nogle generelle punkter, som man med fordel kan følge, når man skal opstille og bruge modeller. I tabellen

er et forslag til punkter vist, som kan følges kronologisk. Det er imidlertid ikke nødvendigt at have alle punkter med, for at en model skal være optimal, det afhænger af problemstillingen.

I tabellen er hvert punkt kommenteret i forbindelse til de viste eksempler.

	DBP i laboratorieforsøg (s.15)	Halveringstid af phthalater i rensningsanlæg (s.20)	LAS, DEHP og NP i Roskilde området (s.22)	DEHP i Roskilde Fjord (s.27)
Spørgsmål	Hvordan fjernes DBP i jord?	Har molekylstrukturen betydning for egenskaberne i miljøet?	Hvad er forekomsten af LAS, DEHP og NP i Roskilde området?	Hvad er forekomsten i Roskilde Fjord, hvor kommer det fra og hvor ender det?
Virkelighed	DBP og jord i en beholder i laboratoriet	DPP, DEHP og DnNP i rensningsanlæg	LAS, DEHP og NP fra forbrug og i rensningsanlæg	DEHP i Roskilde Fjord, vandløb og nedbør
Modelresultater = outputværdier	Opløst DBP og adsorberet DBP	Udløbskoncentrationer fra rensningsanlæg	Indløbs- og udløbskoncentrationer til rensningsanlæg	Koncentrationer i vand og sediment i forskellige dele af fjorden
Modeltype	Fuldstændigt opblandet boks	Fuldstændigt opblandet boks	Koblede fuldstændigt opblandede bokse	Koblede fuldstændigt opblandede og direkte gennemstrømmede bokse
Kriterier	-	Døgnmiddel koncentrationer	Årsmiddel- for emissioner og døgnmiddel for rensningsanlæg	Årsmiddelkoncentrationer
Processer	Nedbrydning og adsorption	Nedbrydning og adsorption	Forbrug, nedbrydning, adsorption og sedimentation	Nedbrydning, adsorption, sedimentation, dispersion
Parametre = inputværdier	-	Slamkoncentrationer og vandstrømme	Forbrugsdata, slamkoncentrationer og vandstrømme rensningsanlæg	DEHP koncentrationer i vandløb, nedbør og udløb fra Dispersions- og diffusionskoefficienter
Matematisk formulering	Massebalance	Massebalance for hver biologisk reaktor	Massebalance for hver biologisk reaktor	Massebalance for bokse
Beregning	Numerisk metode og dynamiske forhold	Numerisk metode og dynamiske forhold	Konstante forhold og numerisk metode	Konstante og dynamiske forhold. Numerisk metode
Eksperimentelle målinger	Total DBP i to forsøg	Total DPP, DEHP og DnNP i indløb og udløb	Total LAS, DEHP og NP i indløb og udløb	Total DEHP i vand og sediment
Kalibrering/-validering	Ja/ Ja	Ja/ nej	Ja/ nej	Ja/ nej
Optimering af modelstruktur	-	Samle alle bioreaktorer i én reaktor	Samle alle bioreaktorer i én reaktor	Forskellig detaljeringsgrad mht. struktur og processer

Sammenfatning

Modeller anvendes overalt, og vi møder dem på mange måder i vores hverdag. Det kan være økonomiske modeller, som finansministeren bruger som argument for at lave skattemæssige stramninger, eller det kan være de prognoser, som mange virksomheder bruger for at fastlægge hvilke produkter og hvor mange af dem, der skal produceres for at tilfredsstille markedet. Aften efter aften præsenteres vi for modeller i form af vejrudsigten, og jævnligt præsenteres vi i medierne for modeller, der viser tøj frem. I alle tilfælde er modellerne et forenklet og idealiseret billede på virkeligheden. Der er altid forskel på landskabet og kortet.

Modeller anvendes for at forenkle tingene på en sådan måde, at de bliver brugbare. Resultaterne af modeller hænger sammen med de forudsætninger, vi vælger. Ændrer vi på forudsætningerne, ja, så får vi et nyt resultat. Faktisk sker nøjagtig det samme i virkeligheden. Fremtiden skabes kun gennem det, vi putter ind i den. Derfor kan flere, der anvender den samme model sagtens være uenige om resultatet, når de har forskellige antagelser. Omvendt kan de også få forskellige resultater, selvom de har de samme antagelser og den samme viden, men anvender forskellige modeller til at tolke denne viden med.

Ikke desto mindre er modeller en forudsætning for at kunne handle fremadrettet, dvs. at være forberedt på fremtiden. Ikke mindst på miljøområdet er dette vigtigt. Det er her vigtigt at kunne forudsige, hvordan miljøets tilstand vil udvikle sig under forudsætning af dette eller hint. Kun herigennem vil det være muligt i tide at gribe ind og "ændre på fremtiden".

Men kan vi være sikre på at modellerne er rigtige? I denne rapport har vi blot gættet på sammenhænge, der kan være gældende, ud fra nogle kemiske overvejelser. Faktisk ved vi, at modellerne ikke er "rigtige", da enhver model er en forsimpning af virkeligheden. Spørgsmålet er snarere, om modellerne er tilstrækkeligt rigtige til, at vi kan bruge beregningerne til at svare på vores spørgsmål.

Dette afhænger blandt andet af, hvad vi ved i forvejen: Hvis vi kun har ringe viden i forvejen, er det let at blive klogere med en model, selvom den måske er ret usikker. Omvendt, hvis vi har en god viden i forvejen, skal en modelberegning være meget god, for at man bliver klogere. I eksemplet med nedbrydning og fastholdelse af DBP er vores viden ikke særlig god, da det er nogle forhold, der kan variere meget fra forsøg til forsøg, og som også varierer meget ude i miljøet på grund af en række forhold (temperatur, bakterie fauna osv.). Så vi er tilfredse med modellen på trods af en vis usikkerhed.

Modeller virker overbevisende, fordi man kan forklare og forstå forhold, som ikke umiddelbart kan ses af målinger. Modeller giver derfor ny viden omkring processer, der er afgørende for skæbnen og effekterne af málte, såvel som ikke málte stoffer. Med tanke på det store antal kemiske stoffer der anvendes nu og nye stoffer der sandsynligvis udsendes til miljøet i fremtiden, synes modeller at være et nødvendigt værktøj. Anvendes modeller med respekt og en sund skepsis, kan den nye viden bruges til at sikre de mest hensigtsmæssige vilkår for mennesker, dyr og miljø i fremtiden.

DMU

Danmarks Miljøundersøgelser er en forskningsinstitution i Miljø- og Energiministeriet. DMU's opgaver omfatter forskning, overvågning og faglig rådgivning inden for natur og miljø.

Henvendelse kan rettes til:

URL: <http://www.dmu.dk>

Danmarks Miljøundersøgelser

Frederiksborgvej 399
Postboks 358
4000 Roskilde
Tlf. 4630□1200
Fax 4630□114

Direktion

Personale- og Økonomisekretariat
Forsknings- og udviklingssektion
Afd. for Systemanalyse
Afd. for Atmosfærisk Miljø
Afd. for Miljøkemi
Afd. for Havmiljø
Afd. for Mikrobiel Økologi og Bioteknologi
Afd. for Arktisk Miljø

Danmarks Miljøundersøgelser

Vejlsøvej 25
Postboks 314
8600 Silkeborg
Tlf. 8920□1400
Fax 8920□1414

Afd. for Terrestrisk Økologi
Afd. for Vandløbsøkologi
Afd. for Sø- og Fjordøkologi

Danmarks Miljøundersøgelser

Grenåvej 12, Kalø
8410 Rønde
Tlf. 8920□1700
Fax 8920□1514

Afd. for Landskabsøkologi
Afd. for Kystzoneøkologi

Publikationer

DMU udgiver temarapporter, faglige rapporter, arbejdsrapporter, tekniske anvisninger, årsberetninger samt et kvartalsvis nyhedsbrev, DMUNyt. En oversigt over DMU's publikationer og aktuelle aktiviteter kan findes på DMU's hjemmeside. Årsberetning og DMUNyt er gratis.

Tidligere TEMA-rapporter fra DMU

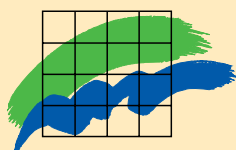


- 6/1996 Status og jagttider for danske vildtarter
Jesper Madsen m.fl., 112 sider, kr. 110,-.
- 7/1996 Naturens tålegrænser for luftforurening
Morten Strandbjerg og Lisbeth Mortensen, 40 sider, Kr. 60,-.
- 8/1996 Anskydning af vildt
Henning Noer m.fl., 52 sider, kr. 80,-.
- 9/1996 Kvælstofbelastning af havmiljøet
Henrik Paaby og Flemming Møhlenberg, 40 sider, Kr. 60,-.
- 10/1996 Havets usynlige liv
Åke Hagström m.fl., 33 sider, kr. 50,-.
- 11/1997 En atmosfære med voksende problemer..., luftforureningens historie
Jes Fenger, 64 sider, kr. 90,-.
- 12/1997 Reservatnetværk for vandfugle
Preben Clausen m.fl., 52 sider, kr. 80,-.
- 13/1997 Næringsstoffer – arealanvendelse og naturgenopretning
Brian Kronvang m.fl., 40 sider, kr. 60,-.
- 14/1997 Mikrobiologiske bekæmpelsesmidler i planteproduktion – muligheder og risici
Niels Bohse Henriksen m.fl., 28 sider, kr. 40,-.
- 15/1997 Kemikalier i hverdagen
Suresh C. Rastogi m.fl., 40 sider, kr. 60,-.
- 16/1997 Luftkvalitet i danske byer
Finn Palmgren m.fl., 64 sider, kr. 90,-.
- 17/1998 Olieeftersforskning og miljø i Vestgrønland
David Boertmann m.fl., 56 sider, kr. 80,-.
- 18/1998 Bilisme og miljø – en svær balance
Mette Jensen m.fl., 48 sider, kr. 60,-.
- 19/1998 Kemiske stoffer i landbruget
John Jensen m.fl., 32 sider, kr. 40,-.
- 20/1998 Naturen og landbruget
Rasmus Ejrnæs m.fl., 76 sider, kr. 100,-.
- 21/1998 Skov og skovvandløb
Nikolai Friberg, 32 sider, kr. 40,-.
- 22/1998 Hvordan står det til med naturen?
Michael Stoltze, 76 sider, kr. 100,-.
- 23/1998 Gensplejede planter
Christian Damgaard m.fl., 40 sider, kr. 60,-.
- 24/1999 Danske søer og deres restaurering
Martin Søndergaard m.fl., 36 sider, kr. 50,-.
- 25/1999 Tropisk diversitet - skov og mennesker i Ecuador
Flemming Skov m.fl., 56 sider, kr. 80,-.
- 26/1999 Bekæmpelsesmidler - anvendelse og spredning i miljøet
Betty Bügel Mogensen m.fl., 48 sider, kr. 60,-.
- 27/1999 Giftige alger og algeopblomstringer
Hanne Kaas m.fl., 64 sider, kr. 80,-.
- 28/1999 Dyreplankton i danske farvande
Torkel Gissel Nielsen, m.fl., 64 sider, kr. 80,-.
- 29/1999 Hvor kommer luftforureningen fra? Fakta om kilder, stoffer og udvikling...
Jytte Boll Illerup m.fl., 32 sider, kr. 40,-.
- 30/1999 Bundmaling til skibe - et miljøproblem
Signe Foverskov m. fl., 48 sider, kr. 60,-.
- 31/2000 CO₂ - Hvorfra, hvorfor, hvor meget?
Jes Fenger, 40 sider, kr. 40,-.
- 32/2000 Risiko og usikkerhed - Miljø og fødevarer
Hans Løkke, 52 sider, kr. 50,-.
- 33/2000 De gode, de onde og de grusomme bakterier
Bjarne Munk Hansen, Anne Winding og Jens Efsen Johansen, 60 sider, kr. 60,-.
- 34/2000 Planter i vandløb
Annette Baattrup-Pedersen, 36 sider, kr. 40,-.
- 35/2000 Fugle i Tøndermarsken
Lars Maltha Rasmussen og Karsten Laursen, 50 sider, kr. 50,-.

De enkelte hæfter i serien beskriver resultaterne af DMU's forskning inden for et afgrænset område. Rapporterne er skrevet på letforståeligt dansk og henvender sig til alle, der er interesseret i miljø og natur. Serien er udformet, så den kan bruges i undervisningen i folkeskolens ældste klasser og i gymnasiet.

Der udsendes store mængder af miljøfremmede stoffer til miljøet hver dag fra industrier såvel som fra privatforbrug. Miljøet er luften, jorden og vandet, der omgiver os, og hvis stofferne ikke på en eller anden måde nedbrydes eller indsamles, vil der være mulighed for, at de vil kunne skade planter, dyr, eller mennesker.

Denne rapport ser på hvordan kemiske stoffer fra vores hverdag bevæger sig, ophobes og nedbrydes, dvs. deres skæbne, i miljøet. I nogle eksempler vises det, hvordan man bygger en model op, og hvordan man med forholdsvis simpel matematik kan få en god og detaljeret beskrivelse af stoffernes skæbne. Eksemplerne viser, at en model er et godt værktøj sammen med eksperimenter, når man skal vurdere kemiske stoffers uheldige virkning på os selv og vore omgivelser.



Danmarks Miljøundersøgelser
Miljø- og Energiministeriet

