

RIJKSINSTITUUT VOOR VOLKSGEZONDHEID EN MILIEUHYGIËNE

BILTHOVEN

Rapport nr. 719102032

**CATS-2: een model ter voorspelling
van accumulatie van microverontreinigingen
in sedimentatiegebieden van rivieren.**

Th.P. Traas, P.R.G. Kramer, T. Aldenberg
en M.J. 't Hart.

Juni 1994

Keywords: rivier, model, cadmium, lindaan, bioaccumulatie, voedselweb

Dit onderzoek is verricht in opdracht en ten laste van het Directoraat Stoffen, Veiligheid en Straling van het Ministerie van Volksgezondheid, Ruimtelijke Ordening en Milieubeheer, in het kader van het Project Ecologische Inpasbaarheid Stoffen (PEIS), project no. 739103 (voorheen 719103) en het project Eco-effecten project no. 719102.

Verzendlijst

- | | | | |
|-----|---|--------|---|
| 1. | prof.dr. C.J. van Leeuwen, DGM/SVS. | 59. | dr. W. Peijnenburg |
| 2. | Plv. Directeur-Generaal Milieubeheer, dr.ir. B.C.J. Zoeteman | 60. | dr. L. Posthuma |
| 3. | dr. G.P. Hekstra, DGM/SVS | 61. | dr. J. Nooteboom |
| 4. | dr. J. de Bruijn, DGM/SVS | 62. | ir. J.M. Knoop |
| 5. | ir. J.F.M. van Vliet, DGM/DWL | 63. | dr. D. van de Meent |
| 6. | ir. P. van der Zandt, DGM/SVS | 64. | drs. D.T. Jager |
| 7. | dr. J. van Wensem, VROM/TCB | 65. | ir. F. Kragt |
| 8. | drs. M.M.H.M. van den Berg, Gezondheidsraad | 66. | dr.ir. P.H.M. Janssen |
| 9. | prof.dr. N.M. van Straalen, Vrije Universiteit | 67. | dr. R. Jongbloed |
| 10. | prof.dr. G. van Straten, LU Wageningen | 68. | dr. L. Braat |
| 11. | prof.dr. H.A. Udo de Haes, CML RU Leiden | 69. | drs. J.B. Latour |
| 12. | dr. F. Colijn, DGW Den Haag | 70. | drs. P.J.T.M. van Puijenbroek |
| 13. | dr. D.A. Jonkers, DGM/DWL | 71. | dr. G.M. van Dijk |
| 14. | drs. J.H.M. Schobben, DGW Den Haag | 72. | dr. L. van Liere |
| 15. | drs. M. Scholten, TNO Den Helder | 73. | dr. J.E.M. Beurskens |
| 16. | ir. M. de Vries, WL Delft | 74. | dr. M.P.M. Janssen |
| 17. | Depôt van Nederlandse publicaties en Nederlandse Bibliografie | 75-82 | Auteurs |
| 18. | prof. dr. W. Admiraal, AET UvA | 83. | Bibliotheek RIVM |
| 19. | drs. F. Klijn, CML Rijksuniversiteit Leiden | 84. | Depôt LWD |
| 20. | drs. M. Klein, IKC, Ministerie van LNV | 85. | Depôt ECO |
| 21. | drs. P. Leonards, IVM Amsterdam | 86. | Hoofd Bureau Voorlichting en Public Relations |
| 22. | dr. E. Evers, Resource Analysis Delft | 87. | Bureau Projecten- en Rapporten Registratie |
| 23. | drs. J. Kammenga, Nematologie LUW | 88-120 | Reserve Exemplaren |
| 24. | dr. W. Cofino, IVM Amsterdam | | |
| 25. | dr. C. van de Guchte, RIZA Lelystad | | |
| 26. | ir. A.J. Hendriks, RIZA Lelystad | | |
| 27. | drs J. Stäb, DZH Den Haag | | |
| 28. | drs. M. Blom, Vakgroep NW&S, RU Utrecht | | |
| 29. | dr. T.C.M. Brock, SC-DLO Wageningen | | |
| 30. | dr H. Loonen, Eur.Chem.Bureau, Italië | | |
| 31. | dr. B. van Hattum, IVM Amsterdam | | |
| 32. | dr. W. de Vries, Staring Centrum Wageningen | | |
| 33. | drs. M. Rossenberg, VROM | | |
| 34. | dr. J. Rozema, VU Amsterdam | | |
| 35. | dr. M. Scheffers, RIZA Lelystad | | |
| 36. | dr. M.H.S. Kraak, AET UvA | | |
| 37. | ir. B. Budde, TU Delft | | |
| 38. | dr. P.E.T. Douben, Inspectorate of Pollution, GB | | |
| 39. | Directie van het Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieuhygiëne | | |
| 40. | ir. N.D. van Egmond | | |
| 41. | prof.dr.ir. F. Langeweg | | |
| 42. | dr. ir. G. de Mik | | |
| 43. | ir. B.A. Bannink | | |
| 44. | prof.dr. H.A.M. de Kruijf | | |
| 45. | drs. A. van der Giessen | | |
| 46. | drs. A.G.A.C. Knaap | | |
| 47. | ir. G.J. Heij | | |
| 48. | drs. J.H. Janse | | |
| 49. | drs. F.G. Wortelboer | | |
| 50. | drs. R. Luttk | | |
| 51. | drs J.H. Canton | | |
| 52. | drs. J. de Greef | | |
| 53. | drs. A.C.M. de Nijs | | |
| 54. | drs. A. Bakema | | |
| 55. | dhr. R. Lammers | | |
| 56. | drs. R. Reiling | | |
| 57. | drs. A.J. Schouten | | |
| 58. | dr. W. Slooff | | |

Inhoudsopgave

Verzendlijst	i
Abstract	iii
Samenvatting	iv
1. Inleiding	1
2. Definitie voedselwebstructuur	3
2.1 Functionele groepen	3
2.2 Definitie voedselwebstructuur	4
3. Modelstructuur	7
3.1 Modelconcept	7
3.2 Modelcompartimenten	8
3.3 Milieuchemische processen	9
4. Dataverzameling en modelcalibratie	13
4.1 Inleiding	13
4.2 Abiotische calibratie: water en sediment kwaliteit	13
4.3 Biomassacalibratie	16
4.4 Bioaccumulatie-calibratie	17
5. Scenario's en modelgedrag	19
5.1 Cadmium	19
5.2 Lindaan	23
6. Risico-analyse	25
6.1 Methode	25
6.2 Cadmium	26
6.3 Lindaan	30
7. Discussie en conclusies	33
7.1 Discussie	33
7.2 Conclusies	36
Bijlage A: Overzicht van de gebruikte normen, LC50's en NOEC's en berekende normoverschrijdingen.	37
Bijlage B: Modelvergelijkingen en parameters.	41
Bijlage C: Parameter-en calibratieverantwoording	55
Bijlage D: Boxplots	63
Dankwoord	64
Literatuur	65

Abstract

CATS is an acronym for Contaminants in Aquatic and Terrestrial ecoSystems. CATS models have been developed for the prediction of fate and risks of toxicants. The aim of these models is to predict future risk levels of toxic substances for food webs. CATS-2 describes the behaviour of toxicants in sedimentation areas of main rivers in the Netherlands, such as Hollands Diep, Haringvliet and Ketelmeer.

Bio-availability of toxicants to aquatic organisms is influenced by many biotic and abiotic characteristics of an ecosystem. Therefore, we integrated fate of toxicants in the abiotic environment with a food web model based on biomass cycling. Cycling of organic matter is the backbone of the model, acting as carrier for the toxicant. The food web consists of algae, zooplankton, bivalves, chironomid larvae, tubificid worms, whitefish, predatory fish, benthivorous fish, diving ducks and fish eating birds (Fig. 1). Cadmium and lindane (γ -HCH) were selected to predict future risk levels in an example ecosystem, the Hollands Diep/Haringvliet area. Risk levels were calculated for two situations. First for the year 2000, with no additional clean-up of the river Rhine, and second for the year 2000 with additional clean-up according to the Rhine Action Programme.

Model calculations predict that risks for both cadmium and lindane decrease, caused by the improvement of water quality in the River Rhine that feeds the area. The high cadmium load of the river Rhine in the past is responsible for high cadmium concentrations in the sediment. Even with additional clean-up, sediment quality does not meet the Dutch quality objective of 2mg/kg d.w. in the year 2000. Except for benthivorous fish, risks for the food web are low in the year 2000 indicating that in general the Rhine Action Plan is successful if its original emission-reduction goals can be achieved.

Samenvatting

CATS is een acronym voor 'Contaminants in Aquatic and Terrestrial ecoSystems'. Het doel van CATS modellen is het voorspellen van het milieugedrag en het risico van toxische stoffen in specifieke ecosystemen. CATS-2 beschrijft het gedrag van toxische stoffen in bezinkingsbekkens van de grote rivieren in Nederland, zoals Hollands Diep en Ketelmeer.

Biologische beschikbaarheid van toxische stoffen wordt beïnvloed door zowel biotische als abiotische karakteristieken van een ecosysteem. In CATS-2 is de milieuchemische verspreiding van de stof gecombineerd met een voedselweb gebaseerd op de biomassa-kringloop. Het voedselweb bestaat uit algen, zooplankton, zoetwatermosselen, chironomiden, tubificiden, witvis, roofvis, benthivore vis, duikeenden en visetende vogels. Risico's van de voorbeeldstoffen cadmium en lindaan (γ -HCH) zijn voorspeld in het Hollands Diep en Haringvliet. Risiconiveaus zijn berekend voor twee situaties. Ten eerste voor het jaar 2000, waarbij de Rijn niet verder gesaneerd wordt. Ten tweede voor het jaar 2000 waarbij er additionele sanering heeft plaatsgevonden volgens het Rijn Actieprogramma.

Het model voorspelt dat risico's voor zowel cadmium als lindaan afnemen van 1982 tot 2000, als gevolg van het verbeteren van de waterkwaliteit van de Rijn die de belangrijkste aanvoer is. De hoge cadmiumbelasting van de Rijn in het verleden is de reden voor de hoge cadmiumconcentraties in het sediment. Zelfs bij additionele sanering volgens het Rijn Actieprogramma voldoet de sedimentkwaliteit niet aan de Nederlandse grenswaarde van 2 mg per kg droog sediment in het jaar 2000. Voor het voedselweb geldt dat de risico's m.b.t. cadmium en lindaan in het jaar 2000 laag zijn, behalve voor benthivore vis. Het Rijn Actieprogramma lijkt succesvol met betrekking tot effecten van cadmium en lindaan, mits de voorgenomen emissie-reductie bereikt kan worden.

1. Inleiding

Achtergrond en doelstelling

Het ministerie van VROM heeft een onderzoeksprogramma gefinancierd, gericht op de ecologische inpasbaarheid van stoffen (PEIS, Hekstra 1990). Dit programma richtte zich op de ontwikkeling van milieunormen gebaseerd op de ecologische schade van toxische stoffen. Binnen dit programma zijn in het project 'Ecosysteemrendement' zogeheten CATS modellen ontwikkeld. CATS is een acroniem voor Contaminanten in Aquatische en Terrestrische Systemen. Met dit type modellen wordt een integratie nagestreefd van de ecologische en de toxische stofkringlopen. Accumulatie in water, (water)bodem, en organismen wordt hiermee samenhangend beschreven. Deze modellen zijn in eerste instantie ontwikkeld om beleidsscenario's voor emissiereductie door te rekenen. Een tweede doel is tevens de voorspelling van risico's van bioaccumulatie in het voedselweb, omdat deze risico's niet expliciet worden meegenomen in de extrapolatietechniek gebaseerd op Van Straalen en Denneman (1989). Het is niet duidelijk of de normen gebaseerd op deze extrapolatietechniek ook toppredatoren beschermen. Een derde doel is de vergelijking van verschillende stofnormen in één ecosysteemtype, zodat vast is te stellen welke normen de strengste zijn. Een vierde doel is de afleiding van normen met CATS modellen, gebaseerd op minimaal risico in het hele voedselweb.

In dit rapport wordt het tweede CATS model beschreven, geschikt voor de voorspelling van risico's van accumulatie van zowel metalen als organische microverontreinigingen in sedimentatiegebieden.

CATS-2: een model voor sedimentatiegebieden van rivieren

CATS-2 is een model ter beschrijving en voorspelling van jaargemiddelde bioaccumulatie van toxische stoffen in het abiotische milieu en in het voedselweb. Het model is ontwikkeld voor de sedimentatiegebieden zoals Hollands Diep, Haringvliet, Ketelmeer en IJsselmeer. De keuze voor dit type water is gebaseerd op de volgende argumenten:

- De ecosysteemstructuur is redelijk goed bekend, waarbij er sterke overeenkomsten bestaan tussen de verschillende bezinkingsgebieden.
- Vanwege de historische en huidige belasting met toxische stoffen zijn sedimenten veelal sterk verontreinigd, zodat schade aan ecosystemen denkbaar is.
- Koppeling aan rivierstroomgebied-studies. De DELTA-studie is een voorbeeld van een integrale analyse van stofstromen in rivierstroomgebieden (Knoop *et al.*, in prep.). De waterkwaliteit die met dit type studies kan worden uitgerekend, fungeert dan als modelinvoer voor risicoschattingmodellen als CATS-2 (Kramer *et al.* 1993).

CATS-2 is gebaseerd op de modelprincipes van de CATS modellenfamilie (Traas & Aldenberg 1992). Elementen van aquatische ecosystemen zijn ontleend aan het eutrofiëringsmodel PCLake (Janse *et al.* 1992) en het model voor de Nederlandse waterkwaliteit WATNAT (De Nijs *et al.* 1993). Het voedselweb is gebaseerd op functionele groepen. In principe bevat een functionele groep altijd meerdere soorten met een gelijke

functie. Het voedselweb wordt gevormd door de functionele groepen aan elkaar te verbinden met een populatiemodel waarin groei, respiratie en predatie zijn opgenomen. Met een dergelijke voedselwebstructuur is het mogelijk om per ecosysteem verschillende AMOEBE-soorten aan te wijzen, die toch tot dezelfde functionele groepen leiden.

Leeswijzer

In dit rapport wordt beschreven voor welke ecosystemen CATS-2 is bedoeld, en op welke algemene voedselwebkarakteristieken dit is gebaseerd (hoofdstuk 2). Vervolgens wordt een kort overzicht gegeven van het modelconcept en de verschillende modelonderdelen (hoofdstuk 3). De gegevensverzameling en modelcalibratie worden beschreven in hoofdstuk 4. Het model wordt gebruikt om bij verschillende saneringsscenario's van de Rijn de accumulatie van cadmium en lindaan (γ -HCH) te voorspellen (hoofdstuk 5). In hoofdstuk 6 worden de risico's van accumulatie in het voedselweb voor de verschillende scenario's berekend. Hoofdstuk 7 eindigt met discussie en conclusies.

2. Definitie voedselwebstructuur

2.1 Functionele groepen

Voedselwebben in CATS-modellen zijn gebaseerd op functionele groepen. Een belangrijke hypothese hierbij is dat organismen binnen een functionele groep geacht worden dezelfde functie te vervullen in een ecosysteem, bijvoorbeeld primaire productie, detritusomzetting, etc. Een CATS-model dat geschikt is voor meerdere, op elkaar lijkende ecosystemen, dient een voedselwebstructuur te hebben die in elk systeem geldig is. Met een dergelijke voedselwebstructuur is het vervolgens mogelijk om per ecosysteem verschillende AMOEBE-soorten aan te wijzen, die toch tot dezelfde functionele groepen leiden. In principe bevat een functionele groep dus altijd meerdere soorten met een gelijke functie. Gaande van primaire producenten naar toppredatoren wordt het aantal herkenbare soorten steeds groter; veelal wordt ook het aantal soorten per functionele groep steeds kleiner.

Een bekend probleem bij voedselwebstudies is het gebrek aan toxicologische informatie over specifieke AMOEBE-soorten. Vaak moeten toxicologische (effect-)parameters ontleend worden aan verwante soorten. Door deze informatie te gebruiken voor functionele groepen kan toch een integrale risicoschatting gedaan worden, zonder dat voor alle soorten binnen een functionele groep specifieke ecotoxicologische gegevens bekend zijn.

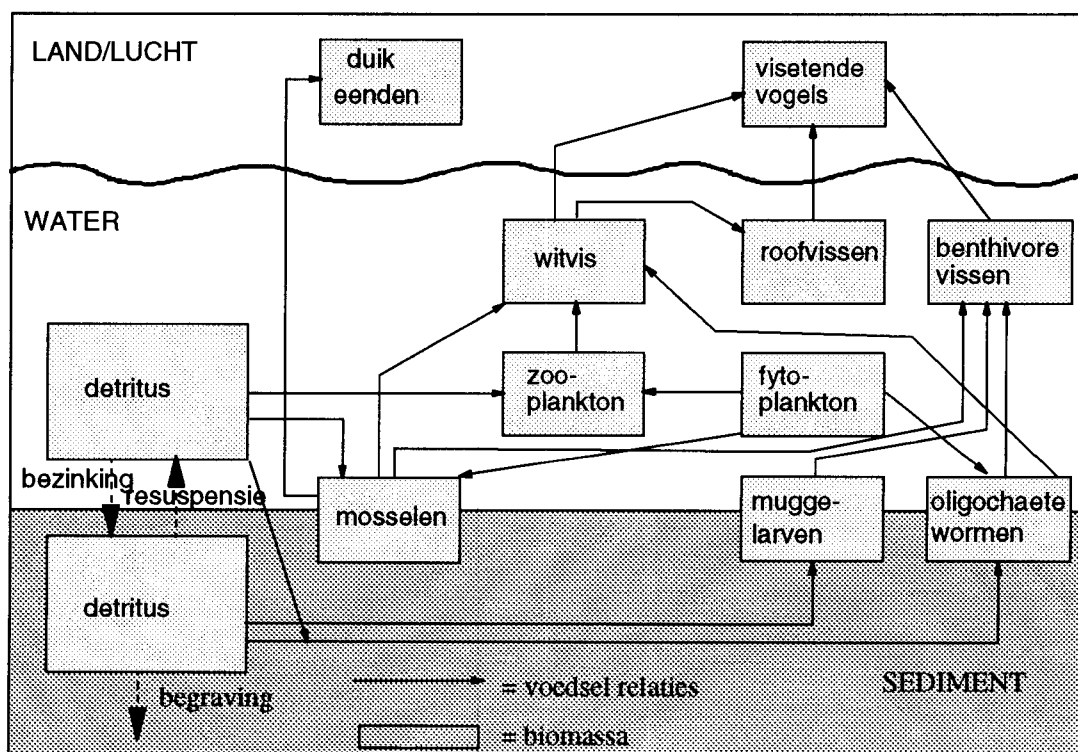


Fig. 1 Voedselrelaties en detritusstromen in CATS-2.

2.2 Definitie voedselwebstructuur

De voedselwebstructuur van sedimentatiegebieden in CATS-2 is voor een belangrijk deel gebaseerd op het rapport 'Amoebes IJsselmeer' (Van Hemelrijk et al. 1993). De samenstelling van het uiteindelijke voedselweb is de resultante van gedocumenteerde ecologische kennis omtrent de gebieden en de haalbaarheid m.b.t. toxicologische gegevensverzameling.

Het voedselweb bestaat uit functionele groepen. Biomassa's van functionele groepen vallen binnen een range die in het veld is waargenomen. Deze range kan afkomstig zijn uit een enkel gebied, bijv. minimale en maximale biomassa, maar kan desgewenst meerdere gebieden bestrijken. De natuurlijke variatie en de onzekerheid hierrin wordt in CATS doorgerekend met behulp van een Monte Carlo analyse.

Hieronder wordt de plaats van elke functionele groep in het voedselweb behandeld (zie fig. 1).

Fytoplankton

Eutrofiëringsmodellen bevatten vaak gedetailleerde kennis omtrent blauwalgen, groenalgen en diatomeeën. Deze typen algen reageren verschillend op nutriënten en licht, waardoor de fytoplanktensamenstelling gedurende het jaar wisselt. In het algemeen zijn de in dit rapport beschouwde sedimentatiegebieden nutriëntenrijk. Toxicologische informatie is slechts beschikbaar voor een aantal laboratoriumalgen, zoals *Chlorella vulgaris* en *Selenastrum capricornutum*. Er zijn echter wel aanwijzingen dat adsorptie van Cd aan blauwalgen veel minder is dan aan groenalgen (Aquire database, US-EPA). Deze informatie is echter nog onvolledig, zodat voor een jaargemiddelde algenbiomassa is gekozen met de accumulatiekarakteristieken van groenalgen.

Zooplankton

Zoöplankton kan door de hoge relatieve filtreersnelheid in sterke mate blootgesteld worden aan toxische stoffen, en kan zo een 'doorgeefluik' zijn voor toxische stoffen van de primaire producenten naar de overige soorten in het voedselweb. Door de geconstateerde voedselvoorkeur van zooplankton voor bepaalde typen algen (liever groenalgen dan blauwalgen, Arnold 1971), kunnen toxische stoffen selectief worden doorgegeven. Het grotere zooplankton wordt in diepe meren als het IJsselmeer en het Volkerak/Zoommeer gekarakteriseerd door filterende soorten van de genera *Daphnia* en *Bosmina* (Cladocera), naast prederende soorten van het genus *Cyclops* (Kerkhofs en Smit 1991, Dorgelo en Van der Kamp 1992). Een dergelijke samenstelling is vergelijkbaar met die van ondiepe meren (Janse en Aldenberg 1990).

Chironomiden

Benthivore insecten bestaan voor een groot deel uit chironomiden (Dudok van Heel et al. 1992, AquaSense 1993). Chironomiden worden in CATS-2 beschouwd als omnivore benthische organismen. Sommige chironomiden eten voornamelijk algen, anderen detritus en algen, terwijl er ook carnivore chironomiden voorkomen (Kerkhofs en Smit 1991). Er wordt vanuit gegaan dat vissen niet selectief verschillende soorten Chironomiden eten, zodat kan worden volstaan met één functioneel omnivore groep muggelarven.

Oligochaete wormen

In veel sedimenten zijn oligochaete wormen, met name Tubificiden, zeer talrijk en vertegenwoordigen ondanks hun geringe individuele gewicht een grote biomassa per m² (Dudok van Heel et al. 1992, 1993, AquaSense 1993). Tubificiden leven in het sediment en eten organisch materiaal uit het sediment. In het algemeen wordt er vanuit gegaan dat hun activiteit voornamelijk in de bovenste 10 cm van het sediment plaatsvindt.

Zoetwatermosselen

Filtrerende zoetwatermosselen zijn een belangrijk onderdeel van het voedselweb in alle sedimentatiegebieden. Behalve de driehoeksmossel (*Dreissena polymorpha*) worden ook de zwanemossel (*Unio pictorum*) en de schildersmossel (*Anodonta cygnea*) aangetroffen. Door het filtreren kunnen zoetwatermosselen net als zooplankton in sterke mate blootgesteld worden aan opgeloste toxische stoffen, naast de toxicanten aanwezig in de algen. Er wordt vanuit gegaan dat zoetwatermosselen niet aan toxische stoffen blootgesteld worden via het sediment, maar wel via het water en algen.

Witvis

'Witvis' is een functionele groep bestaande uit soorten als blankvoorn (*Rutilus rutilus*), kolblei (*Blicca björkna*) en brasem (*Abramis brama*) etc., die voornamelijk benthos eten. Ook de pos (*Acerina cernua*) behoort tot deze groep. Daarnaast kan spiering (een zalmachtige) hoge dichtheden bereiken in diepe meren. Spiering (*Osmerus eperlanus*) eet voornamelijk zooplankton. Bij sommige vissen verandert het dieet tijdens de groei. Blankvoorn en kolblei kunnen pas boven een bepaalde grootte driehoeksmosselen eten. In principe is de blootstelling door verschillen in voedselpakket tijdens de levensduur dus niet constant. Hetzelfde geldt voor de brasem. Aangezien de toxicologische kennis omtrent inheemse vissen gering is, is gekozen voor het combineren van alle belangrijke blootstellingsroutes tijdens de levensduur.

Benthivore vissen

Vissen die voornamelijk benthische organismen eten zijn apart genomen vanwege de afwijkende leefwijze en accumulatiekarakteristiek. Een belangrijke vertegenwoordiger is paling (*Anguilla anguilla*). Omdat de paling voornamelijk bodemfauna eet en een hoog vetgehalte heeft, kunnen organische microverontreinigingen sterk accumuleren. Paling kan vanaf een lengte van 30 cm overgaan op het eten van vis. Deze extra blootstellingsroute niet in het model ingevoerd.

Roofvissen

Snoekbaars (*Stizostedion lucioperca*) en baars (*Perca fluviatilis*) zijn de belangrijkste roofvissen in grote, open meren en benedenlopen (WL 1992, Van Hemelrijk et al. 1993). Grote baarzen eten voornamelijk voorn en alver, snoekbaars eet pos, blankvoorn, kleine brasem, spiering en baars. In troebele meren zonder waterplanten is snoekbaars de dominante roofvis (Van Hemelrijk et al. 1993). De functionele groep roofvissen in het model predeert op de groep 'witvis'.

Duikeenden

Toppereenden (*Aythya marila*) en kuifeenden (*Aythya fuligula*) zijn driehoeksmosseleeters bij uitstek. Het aantal broedparen van de kuifeend is de laatste 20 jaar sterk gestegen. Toppereenden zijn wintergasten, en kunnen driehoeksmosselen uit dieper water halen dan kuifeenden. Alle duikeenden die fourageren op driehoeksmosselen zijn in één functionele groep 'duikeenden' samengebracht.

Visetende vogels

In sedimentatiegebieden komt een groot aantal karakteristieke visetende vogels voor, zoals aalscholver (*Phalacrocorax carbo*), fuut (*Podiceps cristatus*), grote zaagbek (*Mergus merganser*) en nonnetje (*Mergus albellus*). De zaagbekken zijn wintergasten. Accumulatie van toxicanten is het best bestudeerd bij de aalscholver, die de AMOEBE-soort van deze functionele groep is. Alle functionele groepen vis worden gegeten door deze vogelgroep.

3. Modelstructuur

3.1 Modelconcept

Het CATS modelconcept is gebaseerd op de volgende principes, zoals beschreven in het CATS-1 rapport (Traas & Aldenberg 1992):

- Het voedselweb bestaat uit functionele groepen (zie hoofdstuk 2).
- Elke functionele groep groeit volgens een logistische groeivergelijking die zorgt voor een sluitende (toxische-) stoffenbalans .
- De stoffenbalans is gescheiden voor biomassa en toxische stof, waarbij de twee kringlopen uiteraard wel samenhangen (zie § 3.2).
- Biologische variatie in biomassa, graasactiviteit etc. wordt samen met additionele modelonzekerheid doorgerekend in een Monte-Carlo onzekerheidsanalyse (hoofdstuk 4).
- Risico's op overschrijden van effect-drempelwaarden (NOEC's of LC50's) of milieuhygiënische normen worden berekend met behulp van deze onzekerheidsanalyse (Traas & Aldenberg 1994).
- Het model beoogt integratie van kennis uit milieuchemie, toxicologie en ecologie (fig. 2).

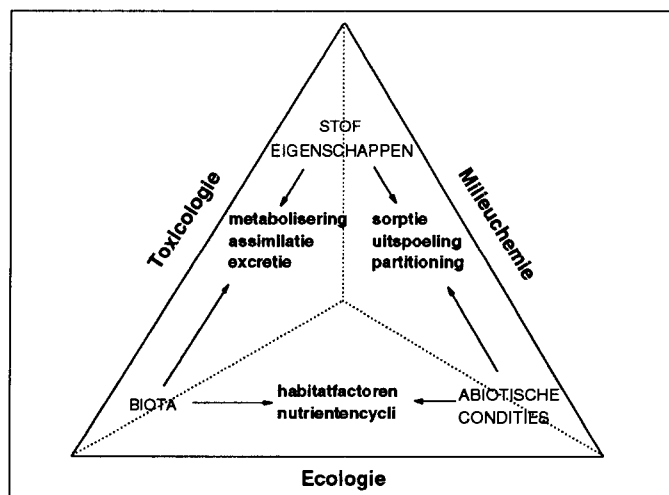


Fig. 2 Relaties tussen milieuchemie, toxicologie en ecologie zoals gebruikt in de integrale CATS modellen (uit: Traas & Aldenberg 1992).

3.2 Modelcompartimenten

CATS-2 bevat toestandsvariabelen voor de biomassa-cyclus (inclusief zwevend stof en detritus) en de toxische stof cyclus. Aparte toestandsvariabelen zijn nodig voor de detritus- en zwevende stof-compartimenten, die gescheiden zijn in opgelost organische stof, zwevend organische stof, zwevend anorganische stof (vooral lutum) en grof zwevend stof (> 63 μm). Deze onderverdeling wordt gehanteerd in verband met de binding van zware metalen aan zowel organisch materiaal (OM) als aan kleideeltjes en metaalhydroxiden (IM). De organische stoffluxen zijn weergegeven in fig 1. Water en daarin voorkomende organismen en zwevend stof stroomt door het te modelleren sedimentatiegebied en verlaat het bekken weer, inclusief opgeloste nutriënten en verontreinigingen, zwevend stof en organismen (fig 3).

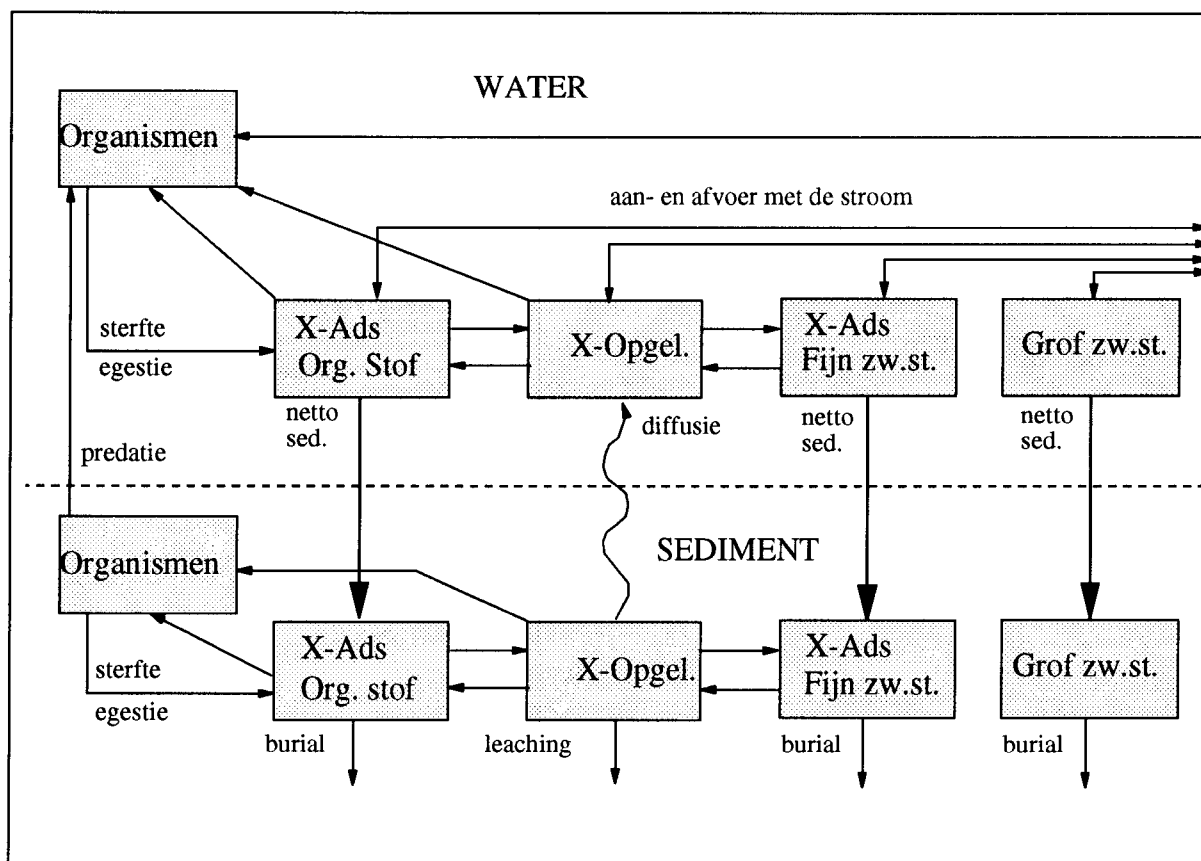


Fig. 3 Processen m.b.t. zwevend stof en sediment.

De basisvergelijking voor de groei van alle functionele groepen is een verfijning van de logistische groeivergelijking (Traas & Aldenberg 1992). Deze vergelijking kent parameters voor maximale groei of filtreersnelheid, respiratie, sterfte en de carrying capacity. Biomassa wordt geconsumeerd, geassimileerd, gerespireerd, gepredeerd en sterft (resp. D_{Cons} , D_{Ass} , D_{Resp} , D_{Pred} en D_{Mort} in fig. 4). Bij afwezigheid van gegevens over de specifieke groei- of respiratiesnelheden zijn deze snelheden geschat met lichaamsgrootte-relaties volgens Peters (1983). De maximale populatieomvang kan worden ingetoomd door predatie en

voedselbeperking.

Zoöplankton en driehoeksmosselen, worden op intensieve wijze blootgesteld aan de toxische stof door hun filteractiviteit. Opname uit water (X_{Up} in fig. 4) wordt in belangrijke mate bepaald door de opname-efficiëntie van de stof uit het water. Filtreeractiviteit van zoöplankton en driehoeksmosselen is in het model opgenomen, zowel voor voedsel als toxische stof (zie bijlage B). Vissen filteren water over de kieuwen, zodat dit de primaire opnameroute is voor opgeloste microverontreinigingen. Vanwege de geringe databeschikbaarheid is dit proces zo eenvoudig mogelijk beschreven als Monod-verzadigingsfunctie, die nagenoeg lineair is bij huidige opgeloste stofconcentraties. Blootstelling aan toxische stoffen vindt ook plaats via het voedsel dat wordt geassimileerd, uitgescheiden, sterft of via predatie wordt doorgegeven (resp. X_{Cons} , X_{Ass} , X_{Excr} , X_{Pred} in fig. 4). Naast excretie is metabolisering eveneens gemodelleerd als eerste orde afbraak. Na excretie komt de stof via faeces in de detritus cyclus terecht, na metabolisering wordt verondersteld dat de originele verbinding uit het modelsysteem is verdwenen. Voor metalen is de metaboliseringssnelheid op 0 gezet.

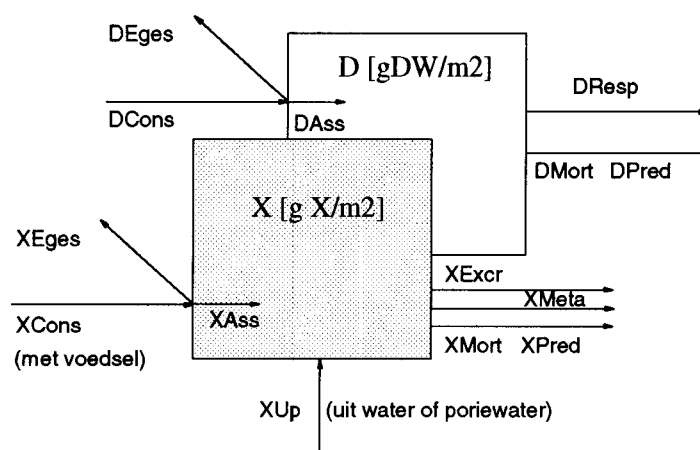


Fig. 4 Algemene processen in de biomassa en de toxische stofcyclus van functionele groepen in CATS-2 (zie tekst).

3.3 Milieuchemische processen

Belasting van het ecosysteem

Toxische stoffen komen het bezinkbekken voornamelijk binnen via depositie en instromend water, zo wel opgelost, geadsorbeerd aan zwevend materiaal als opgenomen door kleine organismen die passief met het water meekomen (fig. 4). Op dezelfde wijze verlaat een aanzienlijk deel van de stof het compartiment. Een groot bekken als het Hollands Diep/Haringvliet wordt via verschillende stromen gevoed. Voor dit gebied zijn alle in- en uitstromen opgeteld m.b.v. het waterkwaliteitsmodel WATNAT (De Nijs *et al.* 1993). Natte en droge depositie van de stof kan bijdragen aan de totale belasting van het systeem. Vooral persistente bestrijdingsmiddelen kunnen na transport door de lucht, de waterkwaliteit op grote afstand nog beïnvloeden.

Bezinking en begraving

In bezinkingsbekkens als het Ketelmeer, Haringvliet en Hollands Diep sedimenteert zwevend materiaal dat aangevoerd wordt met de stroom. Afhankelijk van de stroomsnelheid en de morfologie van de onderwaterbodem bezinkt er veel of weinig materiaal. Omdat CATS-2 ontworpen is voor jaargemiddelde bioaccumulatievoorspelling, is het proces van bezinking en weer opwervelen eenvoudig als netto bezinking gemodelleerd.

Binnen sedimentatiegebieden kunnen sterke verschillen bestaan in sedimentsamenstelling: zowel zanderige als slibbige bodems komen voor. De samenstelling van het sediment is in het model onderscheiden in organisch materiaal (%), fijnere deeltjes inclusief klei (< 63 µm) en grovere deeltjes (> 63 µm). Hiertoe is een begravingsformule ontwikkeld (bijlage B), die de onderscheiden fracties naar rato van aanvoer begraaft. Deze formulering houdt in dat aanwezig vuil sediment (bijv. als gevolg van historische hoge belasting) gemengd kan worden met schoon materiaal dat sedimenteert na sanering. Omgekeerd kan natuurlijk een 'schoon' sediment na een nieuwe vervuiling langzaam mengen met 'vers vervuild' sediment. In de natuur zal door turbulentie en omwoeling de laag waarschijnlijk verstoord worden. In de CATS-2 formulering is niet gekozen voor een sedimentatie-resuspensiebenadering, maar kan de sedimentkwaliteit gecalibreerd worden met o.a. de dikte van de sedimentlaag waarover volledige menging plaatsvindt.

Evenwichten

Toxische stoffen adsorberen selectief aan levende organismen, zwevend stof, humuszuren, hydroxiden, etc. Het zwevend materiaal bezinkt (fig. 3), waarna in het sediment wederom adsorptie- en desorptieprocessen een rol spelen.

De evenwichtsvergelijkingen in het model zijn van essentieel belang. De *biologische beschikbaarheid* van de stof is namelijk operationeel gedefinieerd als de concentratie opgeloste toxicant. Verschillen in bioaccumulatie kunnen verklaard worden door verschillen in biologische beschikbaarheid. De definitie van biologische beschikbaarheid verschilt voor verschillende stoffen. Voor bijvoorbeeld Cu is de binding aan opgeloste organische humuszuren van groot belang voor de beschikbaarheid (mond. med. W. Verweij), voor Cd is deze van minder belang.

De evenwichten in CATS-2 zijn voor cadmium en linaan verschillend geformuleerd. Evenwichten tussen opgeloste toxische stof en de zwevende stof fracties worden berekend met een evenwichtsvergelijking uit de Delta Studie (WL 1994, in prep). Parameters die de lineaire partititicoëfficiënt bepalen zijn de pH, CEC van de fractie bindend materiaal en het chloridegehalte. De partititicoëfficiënt voor de tweede bestudeerde stof, linaan, is geschat m.b.v. een formule op basis van de K_{ow} (Stortelder *et al.* 1989). In anaërobe sedimenten kunnen metalen binden aan 'Acid Volatile Sulfide' (AVS, Di Toro *et al.* 1990), zodat de beschikbaarheid van metalen in deze laag zeer gering moet worden geacht in aanwezigheid van AVS. Thans wordt onderzoek verricht (Van de Hoop *et al.*, in prep.) naar de invloed van AVS op de binding van metalen. Bij het beschikbaar komen van de resultaten kan de modelformulering op dit punt worden aangepast.

Afbraak, vervluchtiging, fotolyse, hydrolyse

Wanneer het CATS model wordt gebruikt voor organische microverontreinigingen, zijn er een aantal afbraak- en verdwijntermen in het model nodig, die bij berekeningen voor metalen geïnactiveerd. Deze worden hieronder besproken.

Organische stoffen worden, zowel in water als sediment, afgebroken door microorganismen.

Het is niet altijd mogelijk de bijdrage van microorganismen te scheiden van andere processen als vervluchting, opname door andere organismen etc. Daarom is gekozen voor een eenvoudige eerste-orde procesvergelijking, zonder de microben zelf te modelleren.

Fotolyse is o.a. afhankelijk van het type verbinding en klimaat en zichtdiepte. Voor linaan wordt het belang van fotolyse en hydrolyse gering geacht ten opzichte van andere processen (Slooff en Matthijsen 1987) en zijn daarom niet gemodelleerd.

Vervluchting is gemodelleerd volgens de dubbellaagtheorie (US-EPA 1985), waarbij de Henry-coëfficiënt en weerstanden in de lucht-grenslaag en de water-grenslaag bekend moeten zijn.

4. Dataverzameling en modelcalibratie

4.1 Inleiding

Modellen bevatten verschillende bronnen van onzekerheid, waaronder de modelstructuur zelf. Daarnaast zijn de startcondities van het model op een gegeven tijdstip vaak niet exact bekend, of zijn modelparameters slechts bij benadering bekend (Janssen *et al.* 1990). In CATS modellen zijn veel parameters inherent variabel omdat binnen functionele groepen meerdere soorten voorkomen. Daarnaast kan er ruimtelijke en temporele variatie zijn van biologische processen. Het is dan ook weinig zinvol te streven naar een exacte parameterwaarde. Het model wordt daarom gecalibreerd op de waargenomen spreiding in veldwaarnemingen m.b.t. biomassa, abiotische concentraties en bioaccumulatie. Hiertoe wordt gebruik gemaakt van Monte-Carlo technieken (Janssen *et al.* 1992), waarbij het model met steeds andere parameterwaarden wordt gedraaid. Op specifieke tijdstippen worden de modeluitkomsten vergeleken met een 'venster' van toegelaten waarden. Vallen de modeluitkomsten binnen de toegestane waarden, dan wordt de modeluitkomst geaccepteerd, zoniet dan worden de modeluitkomsten verworpen. Hierdoor ontstaan ranges van parameterwaarden voor bijv. respiratie of sterfte, die leiden tot acceptabele modeluitkomsten. De hiervoor gebruikte calibratietechniek (hierna genoemd venstercalibratie) is gebaseerd op een mechanisme van Hornberger & Spear (1981) en is beschreven in Traas & Aldenberg (1994). De modelcalibratie voor cadmium is gebaseerd op deze techniek. Lindaangegevens ontbreken deels, zodat de modelonzekerheid voor linaan nog niet is gekwantificeerd.

4.2 Abiotische calibratie: water en sediment kwaliteit

Het CATS-2 model is ontwikkeld voor de voorspelling van risico's van toxische stoffen in sedimentatiegebieden. Een belangrijke reden voor de keuze van deze gebieden is de verwachting dat risico's voor het ecosysteem hier hoog kunnen zijn vanwege de ophoping van verontreinigd sediment. Momenteel zijn er modellen beschikbaar of in ontwikkeling voor de voorspelling van de waterkwaliteit in rivierstroomgebieden (DELTAWAT, Knoop *et al.* in prep.) en in Nederland (WATNAT, De Nijs *et al.* 1993). Het voedselweb in deze modellen is noodgedwongen beperkt. CATS modellen kunnen gekoppeld worden aan deze waterkwaliteitsmodellen om de risico's voor het voedselweb te voorspellen. Deze koppeling geschiedt door modelresultaten uit WATNAT of DELTAWAT in te lezen in CATS. Om te illustreren dat deze koppeling mogelijk is, wordt in CATS-2 gebruik gemaakt van data van het RIZA voor cadmiumconcentraties in water (totaal opgelost, incl. zwevende stof) en sediment. De invoerconcentratie is ontleend aan het meetpunt *Haringvlietbrug*. De metingen in het punt *Haringvlietsluis* stemmen in het algemeen goed overeen met de modelsimulatie (fig. 5). De gemeten, brede range in het sediment is weergegeven in Fig 6. De weergegeven lijn komt uit een simulatie met mediane parameterwaarden. Het organisch stofgehalte en het kleigehalte in het sediment (MIVEOS database) is gebruikt ter calibratie van de sedimentsamenstelling. Geldige modelruns voldoen aan de gemeten range (fig. 7).

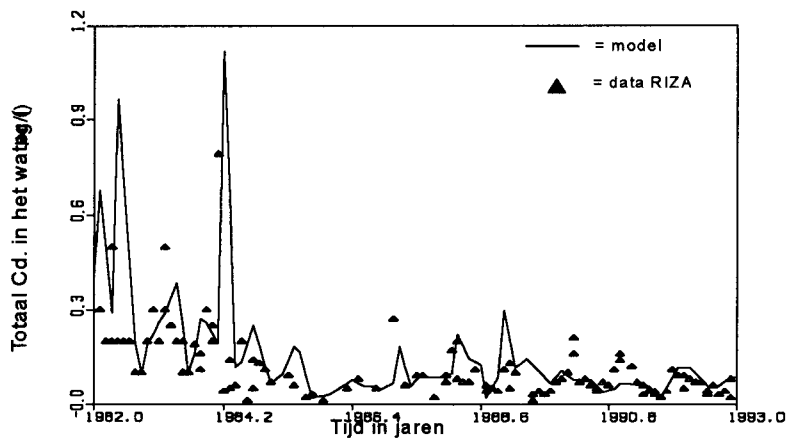


Fig. 5 Totaal opgelost Cadmium (µg/l) in het Hollands Diep/Haringvliet, gemeten (RIZA) en gesimuleerd.

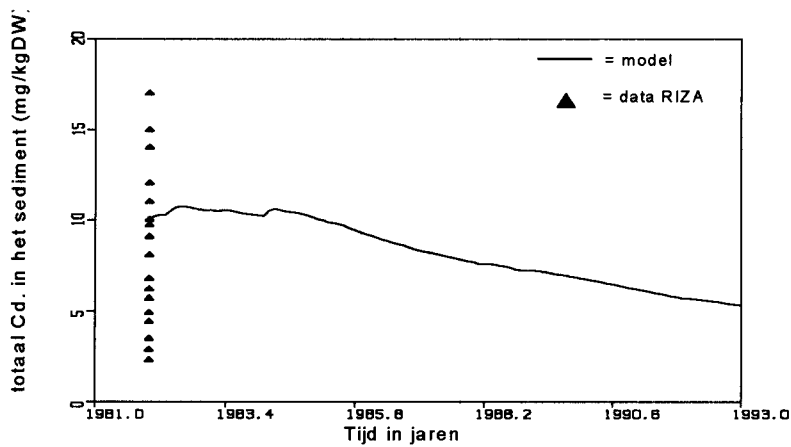


Fig. 6 Simulatie vergeleken met de range van cadmium concentraties in het HD/HV in 1982 (MIVEOS database, RIZA).

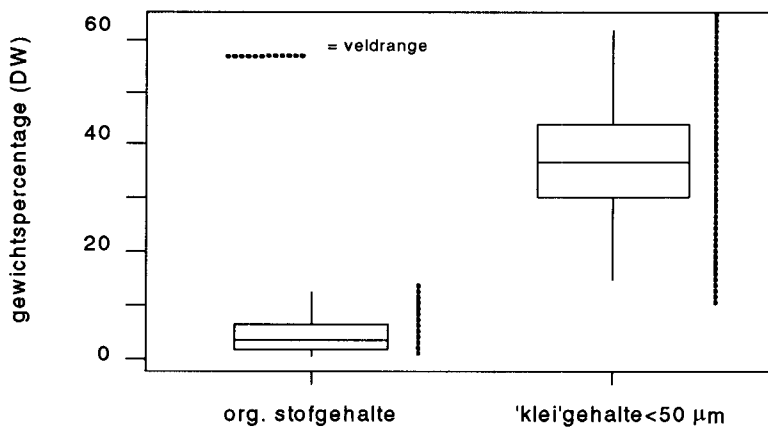


Fig. 7 Sedimentsamenstelling in gewichtsperscentage in het HD/HV zoals gemeten en gesimuleerd met CATS-2 (boxplots).

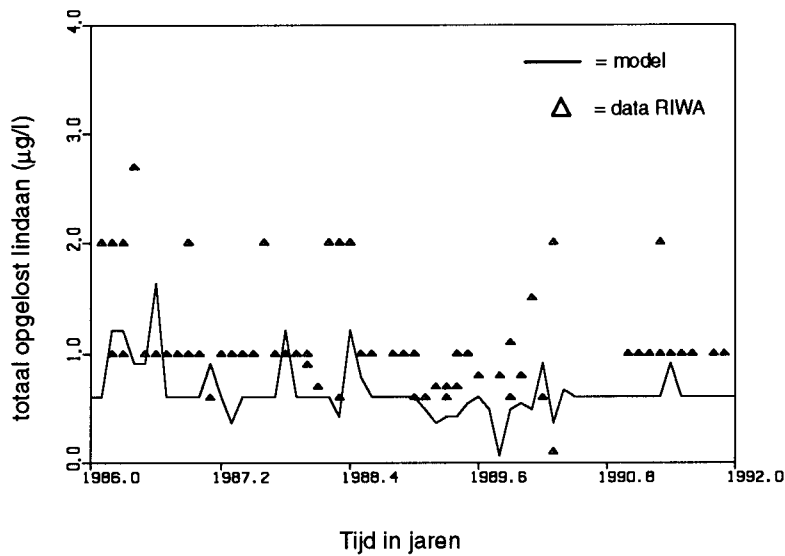


Fig. 8 Gemeten (data RIWA) en gesimuleerde concentratie totaal opgelost lindaan ($\mu\text{g/l}$) in het Hollands Diep/Haringvliet.

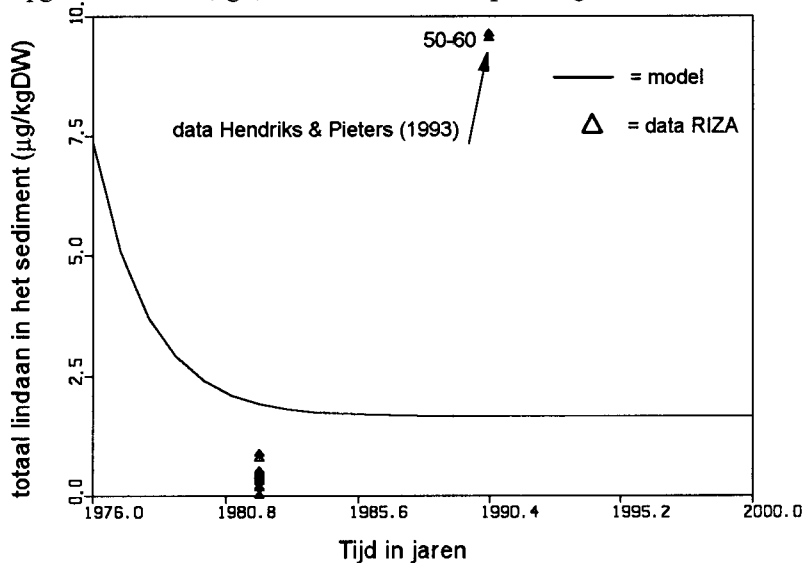


Fig. 9 gemeten en gesimuleerde concentratie lindaan in het sediment van HD/HV ($\mu\text{g/kgDW}$)

Als modelstof voor de verdere ontwikkeling van het CATS model voor organische microverontreinigingen is gekozen voor lindaan. De gebruikte invoerconcentraties zijn ontleend aan het RIWA waterkwaliteitsbestand (fig. 8). Sedimentmetingen zijn helaas schaars. De berekende sedimentconcentraties (fig. 9) liggen wat boven de meetgegevens in 1982. Nagegaan moet worden hoe de schijnbare discrepantie tussen de sedimentgegevens van 1982 (MIVEOS) en de gegevens van 1985-1990 (Hendriks & Pieters 1993) kan worden opgelost.

4.3 Biomassacalibratie

Biomassa's van functionele groepen kunnen tijdens het jaar variëren door bijv. groei en reproductie, seizoensinvloeden en predator-prooi relaties. Daarnaast kunnen langduriger populatiefluctuaties bestaan, zodat er een range van normale biomassa's is waar te nemen. In CATS-2 wordt gecalibreerd op de hele range, voorzover bekend uit veldonderzoek. Door tegelijk te calibreren op biomassa's van alle functionele groepen en de detritus fractie in het sediment, wordt de samenhang tussen alle biomassa fluxen gegarandeerd. De resultaten van de modelberekeningen zijn weergegeven in zogenaamde box-plots. Zie bijlage D voor een toelichting op boxplots.

Omdat macronutriënten als stikstof en fosfor niet in dit CATS model zijn opgenomen, wordt het maximale biomassa niveau van algen bepaald door de 'carrying capacity'. Dit geldt voor alle groepen.

Algenbiomassa is geschat op basis van metingen van het RIZA. Er is vanuit gegaan dat de jaargemiddelde biomassa tweederde is van het zomergemiddelde gehalte (WL 1992). De weergegeven berekende range van algen (fig. 10) valt voor een klein boven de gemeten veldrange, zodat de calibratie voor algenbiomassa niet geheel geslaagd is. Voor de overige groepen is de calibratie van de berekende range op de gemeten range acceptabel (fig. 10, 11).

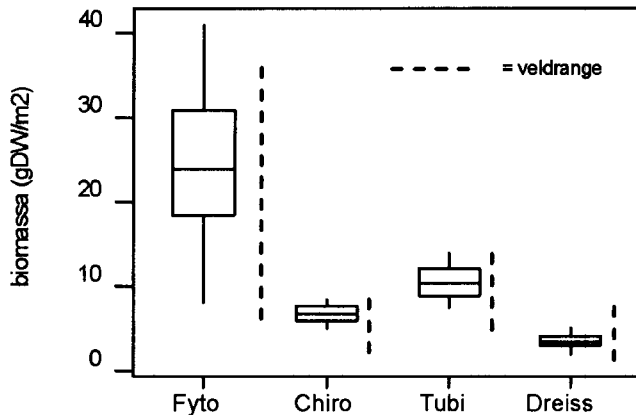


Fig. 10 Biomassa verdeling van functionele groepen in het CATS-2 model (g DW/m²)

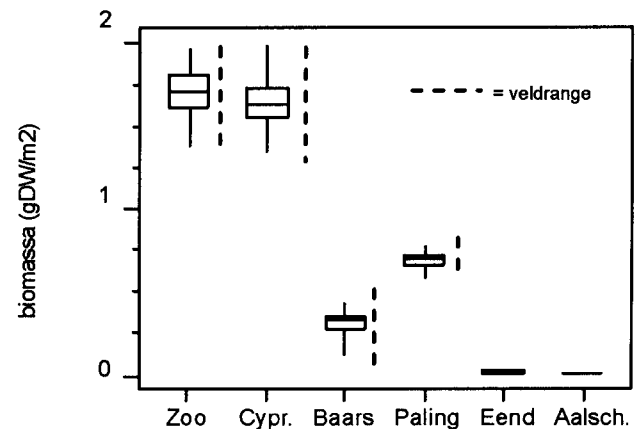


Fig. 11 Biomassa verdeling van overige functionele groepen (gDW/m²)

Processnelheden voor algen en zoöplankton zijn grotendeels ontleend aan PCLoos (Janse & Aldenberg 1990) en WATNAT (De Nijs et al. 1993). Processnelheden voor groei en respiratie zijn meestal geschat met behulp van lichaamsgrootterelaties (Peters 1983). Omtrent natuurlijke sterfte in het veld is weinig bekend, zodat met een range van sterftesnelheden wordt gewerkt. Zolang de biomassa valt binnen waargenomen dichtheden, mag de sterfte variëren tussen relatief lage en hoge waarden. Voor een overzicht van de gebruikte parameterwaarden (na venstercalibratie) en waargenomen dichtheden, zie bijlage C.

4.4 Bioaccumulatie-calibratie

Bioaccumulatie van toxische stoffen wordt in CATS-2 berekend om zode doorgifte van toxische stoffen via het voedsel te kunnen berekenen. De berekende concentratie in de organismen wordt vergeleken met meetgegevens en daarop gecalibreerd.

Bioaccumulatie door algen is in de meeste gevallen slechts verricht aan soorten die goed kweekbaar zijn als *Chlorella vulgaris* of *Selenastrum capricornutum*. Het gekozen opnamemodel van Mang & Trombala (1978) voor metalen gaat uit van een bifasische opname volgens Michaelis- Menten kinetiek. De snelle fase wordt gezien als adsorptie van de stof aan de celwand en de langzame fase als de opname in de cellen. De opnameparameters zijn gecalibreerd door de algenconcentratie te vergelijken met bioconcentratiefactoren uit lab- en veldwaarnemingen (bijlage C).

Aquatische organismen nemen toxische stof op uit het water en uit het voedsel. Voor de meest stoffen, behalve sterk lipofiele stoffen ($Kow > 6$) is de opname uit het water zeer belangrijk. Om de opname uit het water en het voedsel te calibreren, moet men in het ideale geval beschikken over toxicokinetische experimenten waarbij de blootstellingsroutes apart en in combinatie zijn bestudeerd. In de meeste gevallen echter zijn organismen alleen blootgesteld aan water. Dit betekent dat het moeilijk is om de aparte routes goed te calibreren. In CATS-2 is gekozen voor een *generieke invulling* van de route via het voedsel:

- a) Voedselinname wordt berekend in de biomassacyclus (bovenstaande paragraaf)
- b) Ranges voor opnameëfficiëntie en excretiesnelheid worden uit de literatuur gehaald en zonodig ontleend aan gegevens van verwante soorten.
- c) Berekening van de blootstellingsconcentratie in alle biotische compartimenten.
- d) Door a,b en c te combineren wordt de uiteindelijke interne concentratie in de dieren berekend.
- e) De nu berekende interne concentraties worden vergeleken met metingen uit laboratorium (schaars), veld (zeer schaars) of met bioconcentratiefactoren (minst schaars). De opname uit het water wordt in de Monte-Carlo simulaties gevarieerd, en middels venstercalibratie (bijlage C) wordt de toegestane range van gemeten concentraties of bioconcentratiefactoren als het ware opgevuld. Bioconcentratiefactoren zijn ontleend aan de open literatuur en de AQUIRE database (US-EPA). Omdat de concentraties in het water, sediment en organismen allemaal tegelijk worden gecalibreerd, samen met de biomassacalibratie, kan de parameteronzekerheid enigszins teruggebracht worden.

De opname van toxische stof door filtrerende organismen kan eenvoudig worden berekend, omdat het filtreren al in het model is opgenomen om de voedselinname te schatten (bijlage B). De opnameëfficiëntie over kieuwen is de enige parameter die daarvoor nodig is. Voor niet-filterfeedende organismen is deze opname niet geïmplementeerd. Voor vissen wordt een eenvoudige, hyperbolische opnamekinetiek gebruikt.

5. Scenario's en modelgedrag

Het CATS-2 model is gebruikt voor het berekenen van verschillende belastingsscenario's voor cadmium en linaan. Aan de hand van deze scenario's wordt het modelgedrag geanalyseerd.

5.1 Cadmium

Scenario's

Voor cadmium is gebruik gemaakt van twee verschillende scenario's. Het eerste scenario betreft voortzetting van de huidige tendens (fig. 12). De concentratie in 1993 zakt daarna nauwelijks meer.

Het tweede scenario (fig. 13) is ontleend aan het Rijn Actieplan (RAP, Van Dijk & Martijn 1993). Één van de doelstellingen hiervan is het terugdringen van de cadmium belasting naar 70% van de 1985-belasting in het jaar 2000. De gerealiseerde waterkwaliteit in dit scenario is iets beter dan die in het eerste scenario:

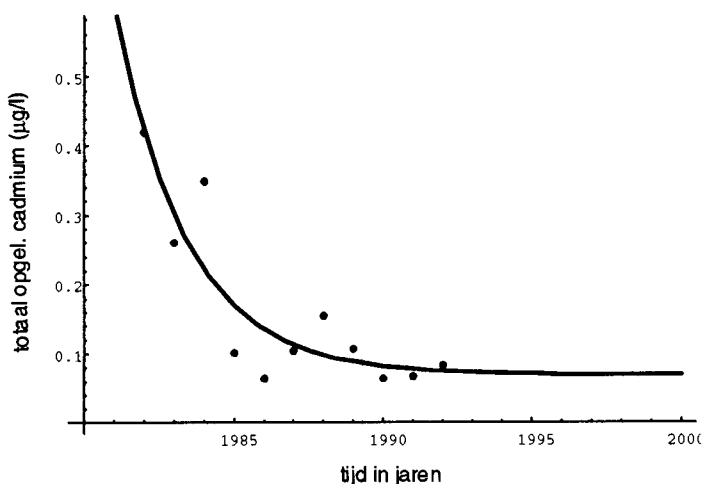


Fig. 12 De conc. totaal opgelost cadmium (incl. zwevend stof) bij scenario 1: geen verdere sanering tot het jaar 2000.

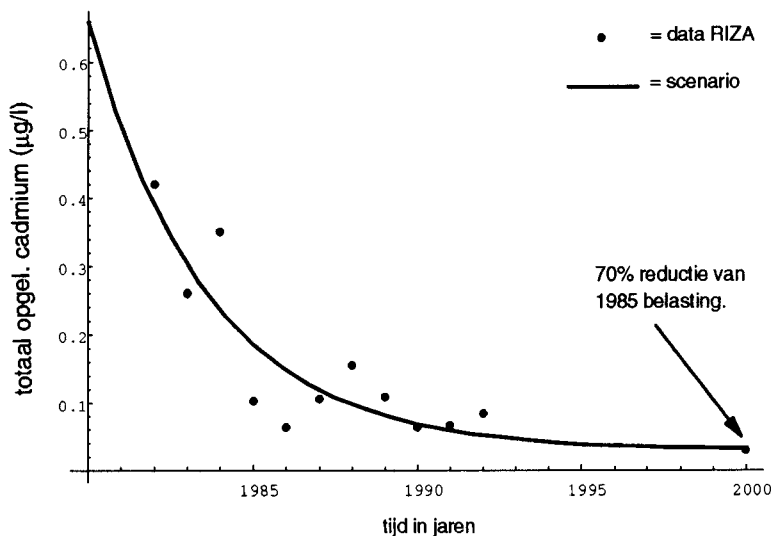


Fig. 13 De conc. totaal opgelost cadmium (incl. zwevend stof) bij scenario 2: sanering volgens het Rijn Actieplan.

Modelgedrag

Bovenstaande scenario's leiden allebei tot een reductie in de concentratie opgelost (beschikbaar) cadmium en cadmium in het sediment. Hieronder wordt het algemene modelgedrag met betrekking tot opname van cadmium in het voedselweb besproken aan de hand van het eerste scenario zonder verdergaande sanering (fig. 12), berekend met gemiddelde (mediane) parameterwaarden.

De invoerconcentratie totaal opgelost cadmium (inclusief zwevend stof) bepaalt hoeveel cadmium er met de stroom het bezinkingsgebied in gaat, en is daarom de werkelijke stuurvariabele van het model. Hiervan afgeleid wordt het tijdsverloop van de blootstellingsconcentratie in water (het opgeloste cadmium) en de sedimentconcentratie. Uit fig. 13 blijkt dat de concentratie in het sediment langzamer afneemt dan de concentratie in het water. Het zwevende stof dat sedimenteert wordt eveneens schoner en dit mengt met het vuilere sediment. Door begraving verdwijnt een deel van dit gemengde sediment uit de toplaag. Het duurt enige tijd voordat de bovenste sedimentlaag vervangen is door schoon sediment. Uiteraard is dit statische beeld te eenvoudig wanneer het sediment verstoord wordt door turbulentie. Hierdoor kan de snelheid van het schoner worden van het sediment worden overschat. Daarnaast is de gemodelleerde laagdikte van het sediment van belang, waarbij een grotere diepte een langzamer schoner wordend sediment oplevert. De calibratie van de snelheid van schoner worden kan alleen door regelmatige metingen van de sedimentkwaliteit worden verbeterd.

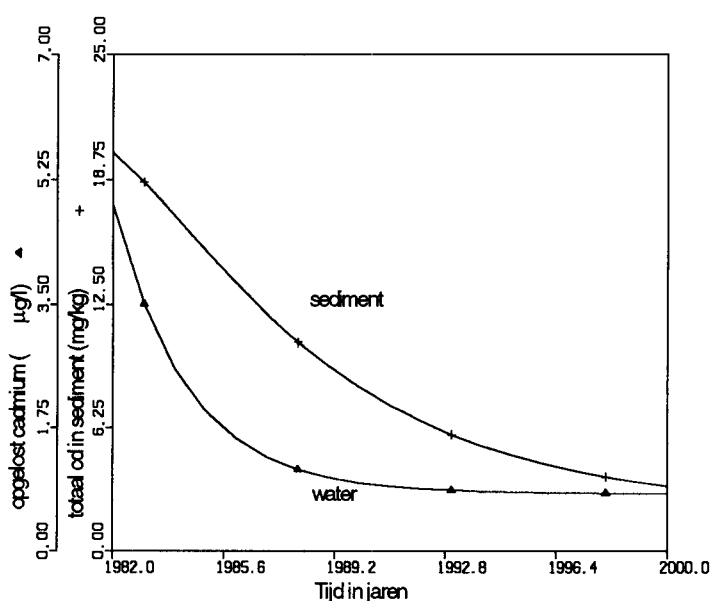


Fig. 14 Opgelost cadmium (µg/l) en totaal cadmium in het sediment (mg/kgDW) berekend met scenario 1 (zie tekst)

De cadmiumconcentraties in het voedselweb vertonen bij de huidige modelformulering en de relatief lage cadmiumconcentraties een nagenoeg lineaire afhankelijkheid van de blootstellingsconcentraties in water en sediment. Dit is al eerder geconstateerd voor terrestrische CATS-modellen (Traas & Aldenberg 1992). Er zijn echter duidelijk verschillen te zien in de dynamiek van de cadmiumconcentraties in het voedselweb. Driehoeksmosselen worden blootgesteld via voedsel (algen) en water, en de cadmiumconcentratie volgt het patroon van het opgeloste cadmium. Vergelijk hiertoe fig. 14 met fig. 15. Cadmium in oligochaete wormen, die de toplaag van het sediment bewonen, volgt het patroon van het sediment. (Vergelijk hiertoe nogmaals fig. 14 met fig. 15).

De verschillende functionele groepen vissen vertonen accumulatie-karakteristieken, die het gevolg zijn van de voedselvoorkeur van de vissen (fig. 16). De berekende concentraties in geheel of gedeeltelijk benthivore vissen volgen duidelijk het patroon van het sediment (vgl. fig. 16 met fig. 14), terwijl concentraties in roofvis (baars, snoekbaars) meer het patroon volgen van het water.

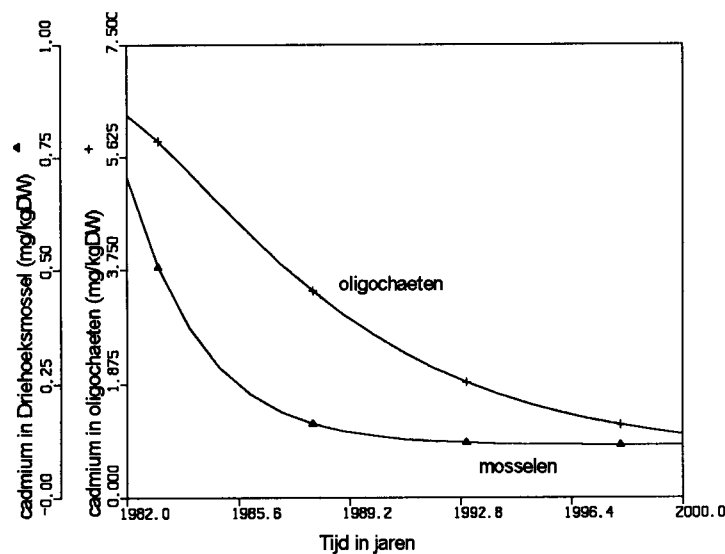


Fig. 15 cadmium in driehoeksmosselen en oligochaete wormen, zoals berekend met het eerste scenario (zie tekst).

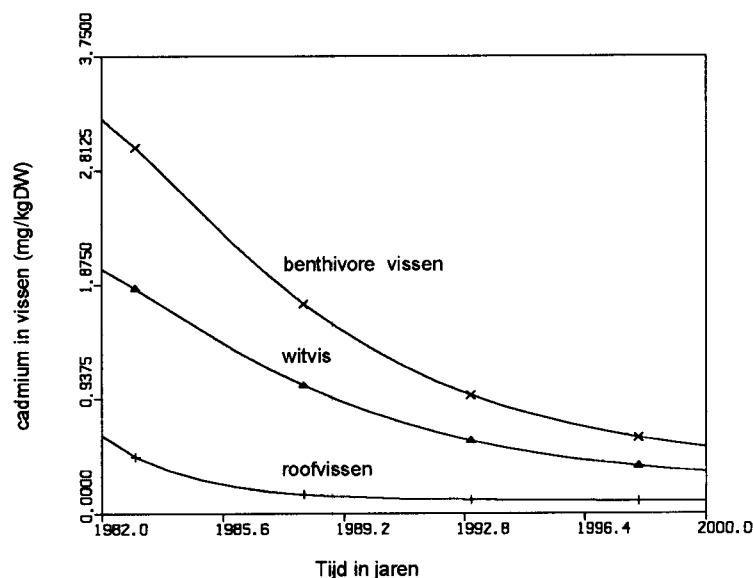


Fig. 16 Cadmium in de functionele groepen vis in CATS-2 zoals berekend met het eerste scenario (zie tekst).

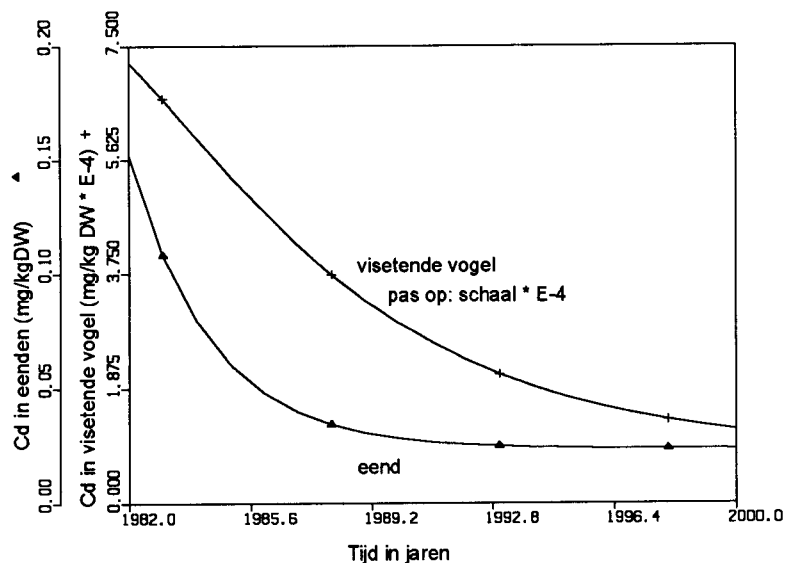


Fig. 17 Cadmium in vogels (mg/kgDW) berekend met het eerste scenario (zie tekst).

Als gevolg van de verschillen in voedselkeuze, zijn er verschillen te zien tussen mosseletende vogels en visetende vogels. Duikeenden die voornamelijk driehoeksmosselen eten, volgen de accumulatiekarakteristiek van de mossel, terwijl visetende vogels de accumulatiekarakteristiek van benthivore vissen volgen (fig. 17). Als gevolg van de hoge blootstelling via driehoeksmosselen is de cadmiumconcentratie in eenden echter veel hoger dan de cadmiumconcentratie in visetende vogels (ongelijke schalen in fig. 17).

5.2 Lindaan

Voor lindaan is gebruik gemaakt van een enkel scenario dat is gefit door de jaargemiddelde HCH invoerconcentratie (fig. 18). De gefitte concentratie neemt af, en zakt daarna nauwelijks meer. Het is mogelijk dat het jaargemiddelde in 1974 een uitbijter is. Het model wordt daarom niet gebruikt om uitspraken voor 1974 te doen.

Met het bovengenoemde scenario is het model gecalibreerd op metingen gedaan in het Hollands Diep en het Haringvliet. In de figuren figuren 19-21 zijn deze aangegeven met driehoekjes. De gehalten in het vet liggen bij de meeste dieren tussen ongeveer 0.1 en enkele milligrammen per kg vet. Volgens het waterkwaliteitsscenario van lindaan (zie hierboven), verbetert de waterkwaliteit tot aan 1980 drastisch. Wat opvalt, is dat zowel dieren die voornamelijk blootgesteld worden via de waterfase zoals driehoeksmosselen, en dieren die ook via het sediment worden blootgesteld, zoals muggelarven en paling, een gelijke accumulatiekarakteristiek vertonen. De al eerder getoonde figuur in het calibratie hoofdstuk (fig. 9) laat zien dat het sediment in nagenoeg hetzelfde tempo schoner wordt als het water (fig. 17). Lindaan is weliswaar niet extreem lipofiel, maar een langzame afbraak in het sediment mag verondersteld worden. De huidige sedimentafbraak is geschat op basis van laboratoriumproeven (W. Peijnenburg, mond. med.), en is inclusief reductieve dechlorering (Beurskens et al. 1994).

De huidige voorspelling van sedimentkwaliteitsverbetering impliceert dat de huidige, relatief lage lindaanbelasting via de Rijn reeds tot een duidelijk schoner sediment heeft geleid door begraving en afbraak van de stof. Hetzelfde patroon tekent zich af in de biota. Deze voorspelling kan bij gebrek aan herhaalde metingen in sediment en biota niet gevalideerd worden.

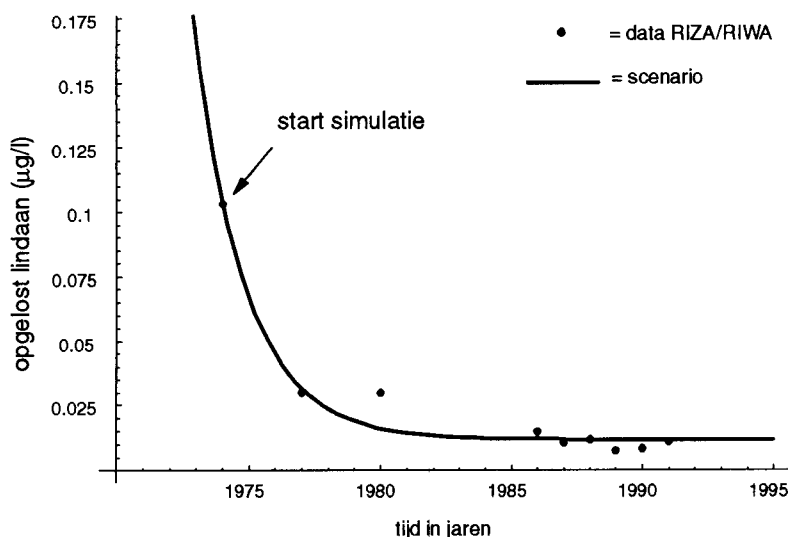


Fig. 18 Scenario voor totaal opgelost HCH (µg/l), gefit op waterkwaliteitsdata voor het Hollands Diep/Haringvliet (RIZA,RIWA).

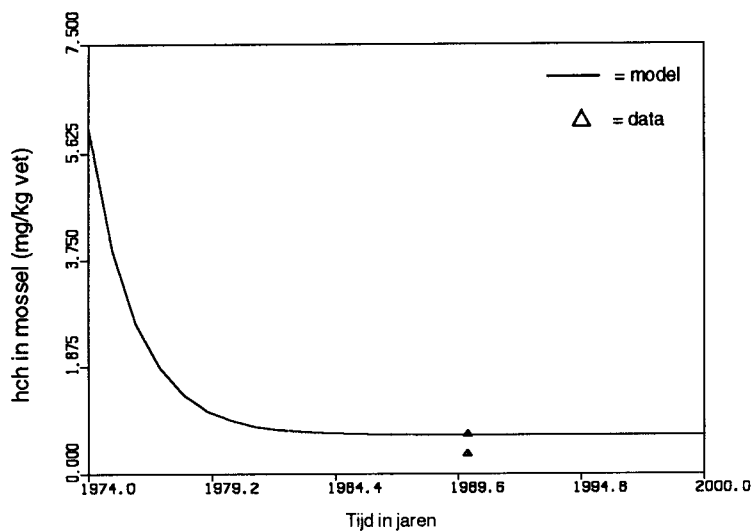


Fig. 19 Berekende concentratie in driehoeksmosselen in het HD/HV, vergeleken met metingen in 1990 (Hendriks & Pieters 1993).

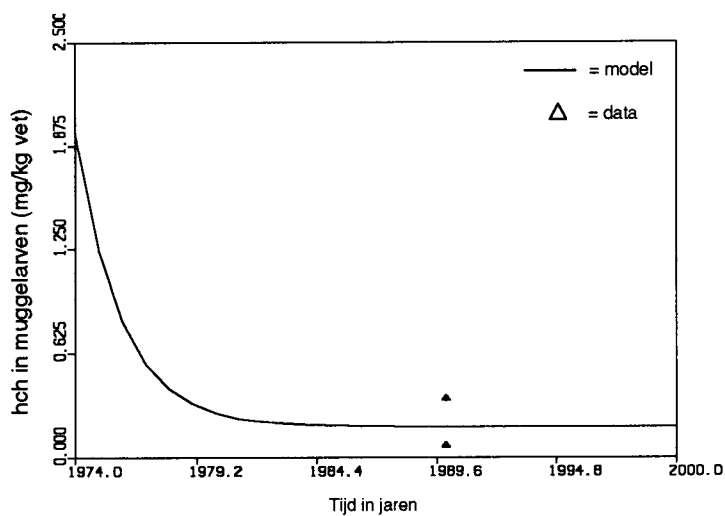


Fig. 20 Berekende concentratie in chironomiden (mg/kg vet) in het HD/HV, vergeleken met metingen (Hendriks & Pieters 1993).

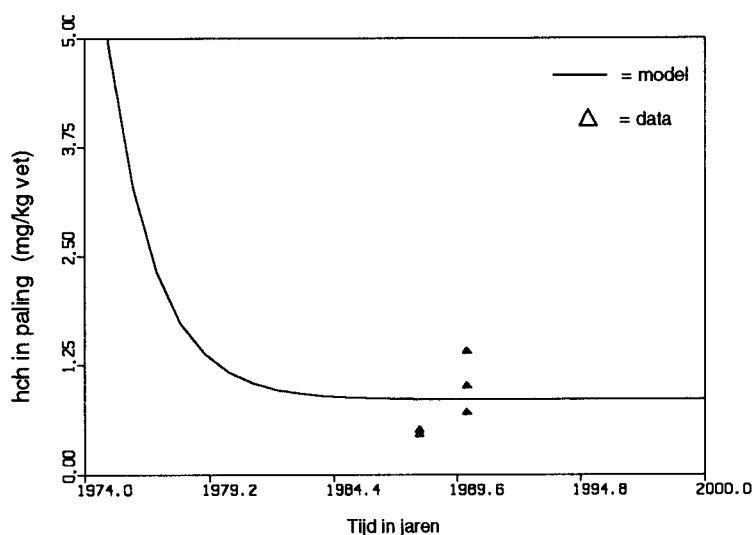


Fig. 21 Berekende concentratie in paling (mg/kg vet) in het HD/HV vergeleken met metingen (Hendriks & Pieters 1993)

6. Risico-analyse

In het voorgaande hoofdstuk werden scenario's voor verbetering van de waterkwaliteit gepresenteerd. In dit hoofdstuk worden deze scenario's gebruikt voor risico-analyse.

6.1 Methode

De gebruikte methode voor risico-analyse is gebaseerd op de modelcalibratie zoals beschreven in Hoofdstuk 4 (Traas & Aldenberg 1994). Modelcalibratie voor toxische stoffen maakt noodgedwongen gebruik van proceskennis uit laboratoria, bioconcentratiefactoren uit laboratoria en veld, en veldmetingen. Daarom zullen parameterwaarden voor de toxische-stofcyclus alleen bij benadering bekend zijn. Als gevolg van deze parameteronzekerheid, zullen de modeluitkomsten geen unieke waarde hebben, maar variëren afhankelijk van de modelinvoer.

Een Monte-Carlo techniek is gevolgd, waarbij de modelinvoer en -uitvoer bestaat uit verdelingen. Deze kansverdelingen worden gebruikt om het risico te schatten dat beschikbare normen, NOEC's of LC50's worden overschreden. Dit scala van normen wordt geëvalueerd omdat een éénduidige norm ter beoordeling van ecosysteemschade nog ontbreekt.

Fig. 22 toont ter illustratie de verdeling van de cadmium concentratie in het sediment in het jaar 2000 bij gelijkblijvende belasting. De kans dat de concentratie in het sediment ligt tussen 0.7 en 1.7 is 1. Het risico is gedefinieerd als de kans dat concentraties boven de norm, NOEC of LC50 liggen, uitgedrukt als percentage (fig. 22). (Traas & Aldenberg 1992). In onderstaande figuur is de kans dat de streefwaarde voor Cd in sediment wordt overschreden, 95%.

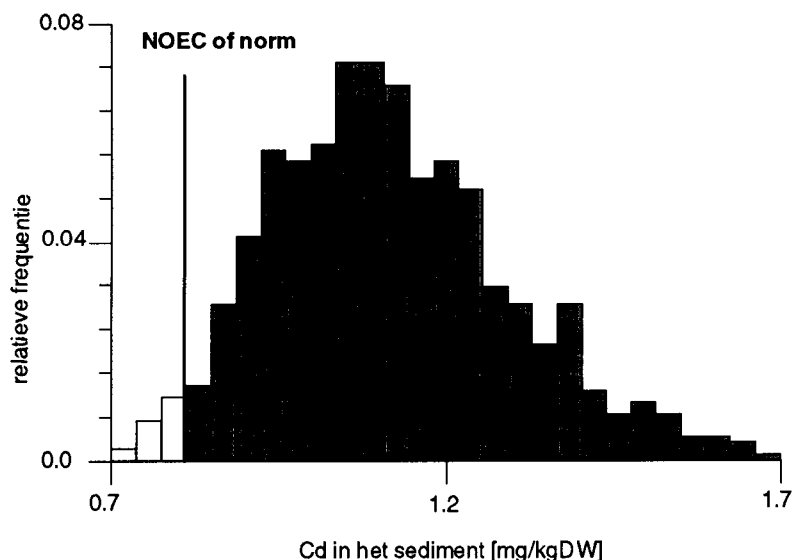


Fig. 22 Kansverdeling van de berekende Cd conc. in het sediment, waarbij het gearceerde gedeelte de kans op overschrijding van de norm is.

6.2 Cadmium

Risico-analyses werden verricht op de volgende tijdstippen aan de hand van de scenario's uit Hoofdstuk 5:

- 1982: historisch risico, vóór de grote cadmiumsanering van de Rijn
- 1994: huidig risico
- 2000: risico in het jaar 2000, zonder verdere sanering
- RAP 2000: risico in het jaar 2000, met een sanering volgens het Rijn Actieplan.

Op deze tijdstippen zijn verschillende categorieën risico's of normoverschrijdingen berekend:

- a. Overschrijding van milieukwaliteitsnormen voor opgelost cadmium, totaal opgelost cadmium (inclusief zwevende stof) en sediment
- b. Visconsumptienormen
- c. Overschrijding van de laagste LC50 per functionele groep, zoals ontleend aan de AQUIRE database (US-EPA)
- d. Overschrijding van de inname-norm voor vogels (Romijn et al. 1991)
- e. Overschrijding van interne effectconcentraties voor driehoeksmosselen, eenden en visetende vogels.

a. Milieukwaliteitsnormen

Er bestaan verschillende sets normen voor de cadmiumgehalten in water, water met zwevend stof en sediment. De volgende normen zijn als uitgangspunt genomen bij het evalueren van de berekende waterkwaliteit met bovengenoemde scenario's:

- Grens- en streefwaarden zoals gedocumenteerd in Stoffen & Normen (VROM 1993).
- Normen afgeleid in het rapport 'Kansen voor Waterorganismen' (Stortelder et al. 1989)
- Achtergrondwaarden uit natuurgebieden in Nederland , zoals vermeld in 'Kansen voor Waterorganismen' (Stortelder et al. 1989)

Zie voor een toelichting op de gebruikte normen bijlage A.

In figuur 23 zijn de risico's op overschrijding van de kwaliteitsnormen voor opgelost cadmium uitgezet, gegroepeerd per tijdstip. In 1982 werden bijna alle normen ernstig overschreden, behalve de grenswaarde (VROM 1993). De huidige waterkwaliteit is al sterk verbeterd: de grenswaarde wordt al niet meer overschreden, en de streefwaarde met een kleine kans van 22.2%. In de toekomst dalen de concentraties bij gelijkblijvende of verdere sanering. Bij de sanering volgens het RAP wordt zelfs de streefwaarde niet meer overschreden (0% risico). De kans op overschrijding van de achtergrondkwaliteit zakt van 100 naar 92.5%. Een soortgelijke voorspelling wordt gegeven voor totaal opgelost cadmium (niet getoond, zie bijlage D). Dit houdt in dat de kwaliteit van het water in het Hollands Diep / Haringvliet in het jaar 2000 voldoet aan de normen van VROM.

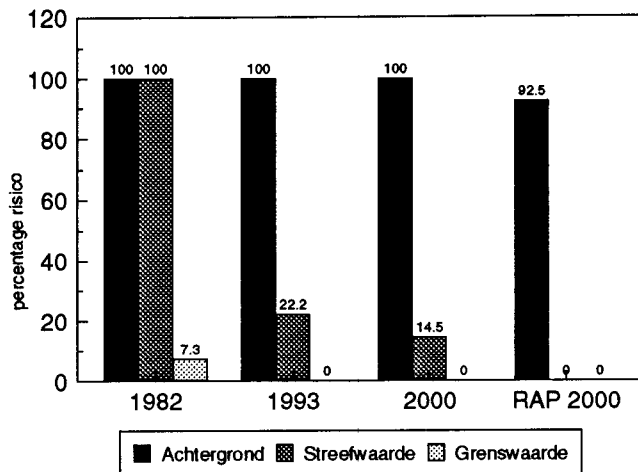


Fig. 23 Risico's op overschrijding van 3 verschillende waterkwaliteitsnormen voor opgelost cadmium.

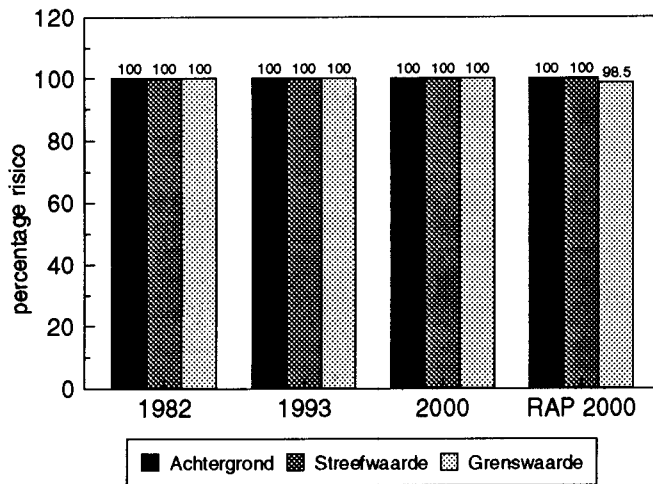


Fig. 24 Risico's op overschrijding van 3 verschillende sedimentkwaliteitsnormen (totaal cadmium).

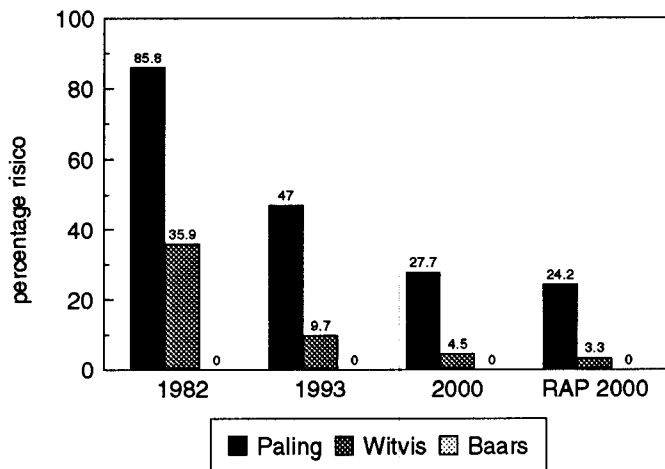


Fig. 25 Risico's op overschrijding van FAO visnormen voor 3 functionele groepen in CATS-2.

De sedimentkwaliteit verbetert veel langzamer dan de waterkwaliteit (fig. 24), zoals de scenarioanalyse ook al had voorspeld (fig. 14). Zowel voor 1982 als voor de huidige situatie van het Hollands Diep/Haringvliet wordt overschrijding van alle milieukwaliteitsnormen berekend. De situaties in 2000, en verder gesaneerd (RAP 2000) laten weinig verbetering zien. Alleen de grenswaarde vertoont een kleine verbetering van 100 naar 98.5% in 2000 (RAP). Hieruit kan geconcludeerd worden dat de sedimentkwaliteit in 2000 waarschijnlijk niet voldoet aan de ecotoxicologische kwaliteitscriteria.

b. Visconsumptienormen

Vissen geschikt voor menselijke consumptie moeten voldoen aan de FAO-kwaliteitseis van 0,05 mg/kg drooggewicht (RIZA 1989). De roofvissen voldeden in het verleden altijd al aan deze norm, en zullen dit ook in de toekomst doen, gezien de verbeterde waterkwaliteit (fig. 25). Benthivore vissen, zoals paling, accumuleren het meeste cadmium, zodat de kans op FAO- normoverschrijding geschat wordt op bijna 50% in 1993. In 2000 zakt dit risico tot ongeveer 25% (fig. 25). Deels benthivore vissen (witvis) accumuleren minder cadmium dan paling, en meer dan roofvissen. Berekende consumptierisico's zijn voor deze groep gering.

c. LC50 waarden

De tot nu toe geëvalueerde normen zijn veelal berekend voor toxiciteitstesten met soorten die meestal niet in één ecosysteem voorkomen. Om het ecologische effect van cadmium te kunnen inschatten, zijn toxiciteitsgegevens nodig van soorten die daadwerkelijk voorkomen in het bestudeerde voedselweb. Deze zijn slechts in een enkel geval voorhanden (van Wijngaarden et al. 1993).

Tabel 1 LC50's/NOEC's ter beoordeling van specifieke soort-toxiciteit in water- en sedimentkwaliteitsscenario's (zie tekst).

soort	LC50	referentie
groenalgen	50	AQUIRE
diatomeeën	2,0	AQUIRE
zoöplankton	0,1	AQUIRE
chironomide n	3,8	AQUIRE
oligochaeten	17,2	AQUIRE
dreissena	9,0 (LOEC)	Kraak et al. 1992
vissen	1,7	AQUIRE

Om te kunnen inschatten of sterfte in het veld kan worden verwacht, is uit de AQUIRE database (US-EPA) per groep de laagste (chronische) LC50-waarde genomen (tabel 1), behalve voor de driehoeksmossel, waarbij de laagste effectconcentratie op de filteractiviteit is genomen (Kraak et al. 1992). De kans dat de blootstellingsconcentratie boven waarden uit tabel 1 komen, is nihil, zelfs voor het 1982-scenario. Dit houdt in dat toxische niveau's waarbij 50% van de dieren sterft, *niet* voorkomen. Lagere sterfte of sublethale-effecten kunnen *wel* optreden.

d. NOEC in voedsel.

Romijn et al. (1991a,b) berekenden een norm voor maximum toelaatbare concentraties in het voedsel van vogels en zoogdieren, gebaseerd op een beperkte set NOEC's. Zij combineerden de data voor vogels en zoogdieren. Hieruit werd een NOEC van 0.35 mg/kg voedsel (DW) berekend. Deze norm is vergeleken met de door het model berekende gemiddelde voedselconcentratie van eenden en visetende vogels.

Het voedsel van duikeenden bevat veel cadmium omdat deze mosselen relatief veel cadmium opnemen. Daarom wordt de norm voor eenden overschreden in 1982 met 88%. Deze overschrijding daalt echter snel tot slechts 0.4 % in 1993 (huidig risico), en is daarna verwaarloosbaar (fig. 26).

Het voedsel van visetende vogels bevat relatief weinig cadmium, zodat de norm nergens wordt overschreden voor viseters (i.e. de kans op overschrijding is 0 of bijna 0). De conclusie hieruit is, dat het voedsel van vogels in het Hollands Diep/Haringvliet na 1993 voldoet aan de norm.

e. Interne NOEC's

NOEC's zijn veelal gebaseerd op *externe* blootstelling. Voor de driehoeksmossel is een voorlopige *interne* no-effect concentratie aangenomen van 10 mg/kgDW (gebaseerd op De Kock & Bowmer 1993, Kraak 1992). Cadmium accumulatie in nieren van vogels en zoogdieren is geschat op basis van een steady-state concentratieverhouding van de nier ten opzichte van de gemiddelde concentratie in het hele dier (Elbers en Traas 1993). De NOEC voor nierschade bedraagt 120 mg/kgDW. Deze interne NOEC's worden eveneens *niet* overschreden.

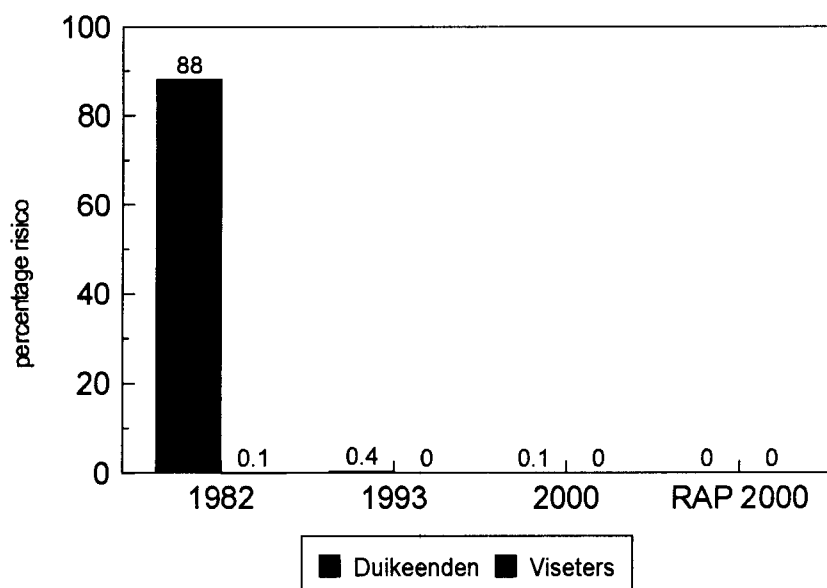


Fig. 26 Risico's op het overschrijden van de norm voor voedsel van duikeenden en visetende vogels op 4 verschillende tijdstippen.

6.3 Lindaan

De waterkwaliteitsgegevens van het Hollands Diep en Haringvliet zijn in hoofdstuk 5 gebruikt voor het fitten van een scenario tot en met het jaar 2000.

Met dit scenario zijn drie overschrijdings-berekeningen gedaan:

- Berekening van het historische niveau in 1982, ter vergelijking met het huidige.
- Berekening van het huidige risiconiveau (1994)
- Berekening van risico's in het jaar 2000, bij gelijkblijvende belasting na 1993

Onzekerheid in de parameters bij toepassing van het model voor lindaan is nog niet volledig in kaart gebracht. Simulatieresultaten zoals in sectie 5.2 voor lindaan zijn vergeleken met bestaande normen, NOEC's, of normen gebaseerd op extrapolatie van een set NOEC's (HC5, Aldenberg & Slob 1993). In tabel 2 staan deze kwaliteitseisen bij elkaar, waarna volgt of de berekende concentratie onder of boven de de kwaliteitseis valt. Deze vergelijking heeft wederom plaatsgevonden in 1982, 1993 en in het jaar 2000.

Opvallend is dat de norm op basis van extrapolatie (de HC5) voor opgelost lindaan niet wordt overschreden. Hetzelfde geldt voor de grenswaarde. De zeer lage streefwaarde (0,2 ng/l) wordt overschreden op alle tijdstippen. Normen voor de sedimentkwaliteit worden volgens de berekening makkelijk overschreden. De grenswaarden voor het sediment (en dus ook de streefwaarde, die lager ligt) worden in het jaar 2000 nog steeds overschreden.

De produktnorm voor lindaan in vis is ontleend aan het rapport 'kansen voor waterorganismen' (Stortelder et al. 1989). Het model voorspelt dat witvis en roofvissen de produktnorm niet overschreden of gaan overschrijden. Benthivore vis (paling) accumuleert echter meer lindaan dan de andere vissen en voldeed daarom niet aan de produktnorm in 1982 en 1993. Door de verbetering van de sedimentkwaliteit wordt echter voorspeld dat benthivore vissen in het jaar 2000 wel aan de produktnorm voldoen.

De berekende maximum toelaatbare concentratie in het voedsel van duikeenden, driehoeksmosselen, wordt niet overschreden vanaf 1982. Tussen 1987 en 1982 is dit volgens het lindaanscenario wel degelijk het geval geweest. De overige blootstellingsnormen via het water, zijn voor de genoemde organismen ontleend aan Van Dam (1992). Voor geen van de genoemde soorten wordt de chronische NOEC overschreden.

Bij het interpreteren van deze tabel moet bedacht worden dat de modelonzekerheid m.b.t. de lindaanparameters nog niet is gekwantificeerd. Dit kan leiden tot zowel hogere als lagere modeluitkomsten. De kans dat normen worden overschreden, is dan wel te kwantificeren (zie het cadmiumvoorbeeld).

Tabel II Normen, NOEC's en kwaliteitseisen voor lindaan, vergeleken met berekeningen op verschillende tijdstippen. De berekening kan onder (-)of boven (+) de norm uitvallen.

Norm	waarde	1982	1994	2000
HC5 (v. Dam 1993)	0.75 ug/l opgelost	-	-	-
grenswaarde water	0.01 ug/l opgelost	-	-	-
streefwaarde water	0.2 ng/l opgelost	+	+	+
grenswaarde sediment	0.5 µg/kg sediment	+	+	+
streefwaarde sediment	0.025 µg/kg sediment	+	+	+
RIZA 1989	7 µg/kg sediment	+	+	+
FAO visnorm	200 ug/kg witvis	-	-	-
FAO visnorm	200 ug/kg roofvissen	-	-	-
FAO visnorm	200 ug/kg benthivore vissen	+	+	-
voedselnorm (Romijn et al.)	0.16 mg/kg voedsel eend	-	-	-
NOEC D. Magna	0.75 ug/l opgelost	-	-	-
NOEC vis	8.8 ug/l opgelost	-	-	-
NOEC algen	150 ug/l opgelost	-	-	-

7. Discussie en conclusies

7.1 Discussie

7.1.1 Modelstructuur

CATS modellen zijn gebaseerd op een aantal principes (Traas & Aldenberg 1992) waarvan de twee belangrijkste zijn:

- het bijeenbrengen van soorten in functionele groepen.
- het berekenen van de kringloop van zowel de toxische stof als de biomassa.

De belangrijkste stofstromen van de toxische stof, zowel door milieuchemische verspreiding als door het voedselweb en het detritus zijn hiermee in kaart gebracht. Deze integratie wordt gezien als een belangrijk doel voor de ecotoxicologie (o.a. Van Straalen 1994). Door de relaties tussen het voedselweb en het abiotisch milieu wordt het ecologisch realisme van het model vergroot, vooral waar het de invloed van het voedselweb op de biologische beschikbaarheid betreft. Een hogere complexiteit van het model betekent echter ook een grotere ontwikkeltijd en databehoeft. De voordelen van dit type model moeten dan ook blijken uit een aantal toepassingen:

- Het eenvoudig kunnen aanpassen aan andere verontreinigingen. CATS-2 is nu geschikt voor organische microverontreinigingen en zware metalen. Per stof kunnen kleine aanpassingen noodzakelijk zijn die weinig tijd vergen.
- Het parametriseren van het model voor toepassing op andere gebieden. Voor andere CATS modellen is dit al mogelijk gebleken (Traas & Aldenberg 1994).

Integratie van milieuchemische en ecotoxicologische kennis wordt gekenmerkt door het niet-compatibel zijn van eenheden, meetlocaties en meettijdstippen (Kay 1985). Dit leidt tot modelonzekerheid, o.a. als gevolg van dataconversies (Kay 1985). Additionele modelonzekerheid bestaat o.a. uit biologische variabiliteit en proces-onzekerheid. Deze problematiek is deels op te lossen door een combinatie van onzekerheidsanalyse en risico-analyse (Traas & Aldenberg 1994). Voor cadmium is in CATS-2 de onzekerheid van de belangrijkste modelinvoer gekwantificeerd en gebruikt voor de risico-analyse. Niet alle modelonzekerheid is echter te kwantificeren.

Voor een belangrijk deel is de modelonzekerheid te wijten aan het (nagenoeg) achterwege blijven van simultane monitoring van abiotische en biotische milieukwaliteit. Onze kennis van het gedrag van toxische stoffen in aquatische voedselwebben is voornamelijk gebaseerd op accumulatiekarakteristieken van een aantal soorten. Slechts in een beperkt aantal gevallen is het mogelijk om abiotische milieukwaliteit en accumulatie van toxische stoffen in biota op dezelfde locaties te vergelijken (Hendriks & Pieters 1993).

7.1.2 Calibratie

Calibratie van het model berust voor een groot deel op het gebruik van Monte-Carlo technieken, waarbij er gebruik gemaakt wordt van een acceptatie/verwerpings stap tijdens de

ontwikkelfase en de uiteindelijke modelberekeningen (bijlage A). Hiermee is het mogelijk om te controleren of de concentratie in verschillende compartimenten voldoet aan veldmetingen. Indien het model niet voldoet aan één of meer van de gemeten ranges, valt de modelberekening af. Op deze wijze blijven alleen de modelberekeningen over die voldoen aan alle ingevoerde veldranges. Deze werkwijze is gevolgd voor cadmium. Voor abiotische metingen werd gebruik gemaakt van (delen van) de MIVEOS database, de WAKWAL database, de RIWA database en metingen aan zwevend stof (Venema 1991). Waterkwaliteitsgegevens zijn voldoende aanwezig zodat modelcalibratie van de hoeveelheid totaal aanwezige toxische stof goed kan worden voorspeld. De opgeloste concentratie wordt door het model gesimuleerd.

Cadmium en linaan concentraties in het sediment van het Hollands Diep/Haringvliet waren slechts beschikbaar op een enkel tijdstip. Dit geldt bovendien voor bijna alle metingen aan soorten in dit gebied. De modelonzekerheid als gevolg van het sediment en het voedselweb kan worden teruggebracht wanneer met tijdreeksen gewerkt wordt. De koppeling van abiotische en biologische meetnetten is om deze redenen zeer gewenst.

7.1.3 Risico-analyse

De risico's voor het voedselweb zijn gebaseerd op het extrapoleren van de waterkwaliteitsgegevens van de WAKWAL en RIWA database. Uit deze gegevens blijkt dat de concentratie cadmium en linaan in de Rijn de laatste 20 jaar sterk gedaald is. De risicoberekeningen zijn gebaseerd op deze verbetering, of een verdergaande sanering volgens het Rijn Actie Plan (Van Dijk & Marteijs 1993). Zoals in elke scenario-analyse zijn de resultaten sterk afhankelijk van het gekozen scenario. De voordelen van het werken met scenario's gefit op waterkwaliteitsdata zijn:

- gebaseerd op beschikbare gegevens
- het bespaart rekentijd
- een nieuw scenario is eenvoudig gemaakt als de waterkwaliteit afwijkt van de voorspelling

cadmium

De waterkwaliteit (opgelost cadmium) is vanaf 1982 drastisch verbeterd (fig. 12). De modelberekeningen voorspellen voor het jaar 2000 geen overschrijding meer van de streefwaarde (VROM 1991). De kans dat in het jaar 2000 de grenswaarde wordt overschreden is 0 procent, mits de doelen van het RAP haalbaar zijn. De waterkwaliteit zal dan goed zijn. De sedimentkwaliteit verbetert echter aanzienlijk langzamer. Wanneer nu de risico's voor bentische organismen worden geschat op basis LC50 waarden of NOEC's, blijken deze gering te zijn (tabel 1). Deze waarden gelden echter voor blootstelling via de waterfase. De blootstelling via het sediment kan echter aanzienlijk zijn. Dit blijkt uit de verhoogde risico's voor benthivore vissen als paling ten opzichte van andere vissen (fig. 25).

De blootstelling van chironomiden en tubificiden via het sediment is moeilijk te kwantificeren. De calibratie van sedimentblootstelling in CATS-2 is voornamelijk gebaseerd op metingen

waar zowel de sedimentkwaliteit als de concentratie in soorten is gemeten (Timmermans 1991). De risico voorspelling van deze organismen en hun predatoren is gebaat bij een verdere ontwikkeling van sediment-toxiciteitstoetsen waarbij zowel gekeken wordt naar accumulatie als naar effecten.

Doorgave van toxische stoffen in de voedselketen leidde in 1982 nog tot verhoogde risico's voor duikeenden (fig. 26). Met het saneren van de Rijn lijkt voor zowel duikeenden als viseters dit probleem te zijn opgelost, berekende orgaangehaltes zijn eveneens laag. De gebruikte norm voor voedsel (Romijn et al. 1991) is gebaseerd op extrapolatie van een beperkt aantal toxiciteitsgegevens van voornamelijk hoenderachtigen. De gevoeligheid van deze vogels hoeft niet overeen te stemmen met die van duikeenden of viseters. Een verbetering van deze extrapolatie is mogelijk door de toxiciteitsgegevens te corrigeren (Jongbloed et al. 1994).

lindaan

De risico-analyse voor lindaan is gebaseerd op een enkele modelrun, die o.a. gecalibreerd is op de gegevens van Hendriks & Pieters (1993). De gegevens omtrent de sedimentkwaliteit zijn niet eenduidig, zodat de aangegeven risico's kwalitatief zijn. Ook voor lindaan geldt, dat de waterkwaliteit sterk is verbeterd sinds 1982. De sedimentkwaliteit voldoet niet aan de norm (VROM 1991). Dit leidt tot verhoogde consumptierisico's wat betreft benthivore vis, als paling. Normen voor voedselkwaliteit van volges worden niet overschreden. De NOEC van de zeer gevoelige *Daphnia magna* wordt eveneens niet overschreden. De norm gebaseerd op extrapolatie van een beperkte set toxiciteitsgegevens (de HC5-50) wordt eveneens niet overschreden. Risico's van lindaan blijken eveneens het grootst voor sedimentbewonende organismen en hun predatoren. Calibratie van de sedimentkwaliteit verdient daarom de hoogste prioriteit.

7.1.4 Effecten

De huidige risico-berekeningen zijn gebaseerd op verspreiding en accumulatie van de toxische stof in het voedselweb. In enkele gevallen is het mogelijk om interne concentraties te relateren aan lethale effecten (zoals voor tin, zie Tas 1993). Voor cadmium en zoetwatermosselen is een interne NOEC geschat van 10 mg/kgDW (zie Hfdst 6). Wat de uiteindelijke negatieve gevolgen zijn voor de populatie is echter onduidelijk. Het gebruik van LC50 waarden bij de risicoschatting voor populaties is eveneens onduidelijk.

Wanneer een LC50 waarde voor een soort niet wordt overschreden, is het mogelijk dat een kleiner deel (kleiner dan 50%) van de populatie wel sterft. Door de concentratie-effekt kromme waaruit de LC50 is afgeleid op te nemen in het model, kan een brug geslagen worden tussen enkelsoort-toxiciteit en ecosysteem-toxiciteit (Traas & Aldenberg, in prep.).

7.2 Conclusies

Algemeen

- Het CATS-2 model is ontwikkeld voor het analyseren van risico's voor het aquatische ecosysteem, gestuurd door scenario's zoals de sanering van de Rijn volgens het Rijn ActiePlan. Het model kan nu toegepast worden in rivierstroomgebiedstudies, of gekoppeld worden aan integrale waterkwaliteitsmodellen.
- Voorlopige berekeningen laten zien dat het CATS-concept aangepast kan worden voor organische microverontreinigingen. Hiermee komt een instrument beschikbaar ter integratie van milieuchemische en toxicologische kennis van dit type verbindingen.
- Door het fitten van een eenvoudige functie door waterkwaliteitsgegevens kunnen zowel historische als toekomstige risico's worden berekend.

Risico's

- De belasting van de Rijn met zowel cadmium als lindaan is de laatste jaren gedaald. Dit leidt in het jaar 2000 tot een waterkwaliteit in het Hollands Diep/Haringvliet waarbij de grens- en streefwaarde voor cadmium niet meer wordt overschreden. De grenswaarde voor lindaan wordt in het jaar 2000 niet meer overschreden, de streefwaarde echter wel.
- Grens- en streefwaarden met betrekking tot het sediment in het Hollands Diep/Haringvliet worden zowel voor cadmium als lindaan overschreden. Een reductie van de vracht in het kader van het Rijn ActiePlan is niet voldoende om in het jaar 2000 een sedimentkwaliteit te garanderen die voldoet aan de streefwaarde.
- De consumptiekwaliteit van benthivore vis (paling) volgens FAO-normen lijkt m.b.t. HCH niet gehaald te worden. Voor cadmium verbetert de situatie na 1993, zodat het risico op te hoge gehalten in het jaar 2000 wordt teruggedrongen naar 25%.
- Doorgave van lindaan en cadmium in de voedselketen leidt bij duikeenden en visetende vogels in 2000 niet (meer) tot negatieve effecten.

Bijlage A: Overzicht van de gebruikte normen, LC50's en NOEC's en berekende normoverschrijdingen.

A1 Normen, NOEC's en LC50's

Milieukwaliteitsnormen in aquatische ecosystemen zijn opgenomen in het MILBOWA document (VROM 1991) en Stoffen en Normen (VROM 1993). De meest gehanteerde normen zijn de streefwaarde en de grenswaarde. De streefwaarde is gedefinieerd als 0.01 * grenswaarde. In veel gevallen is de streefwaarde lager dan gemeten achtergrondwaarden in natuurgebieden in Nederland. In dat geval wordt vaak de achtergrondwaarde als streefwaarde gehanteerd. Voor cadmium en lindaan is dan ook gekozen voor het vermelden van de overschrijding van bekende achtergrondwaarden in natuurgebieden.

A1.1. cadmium

norm	waarde	referentie	
opgelost, MILBOWA grenswaarde	0.06 ug/l	VROM (1991)	
opgelost, MILBOWA streefwaarde	0.01 ug/l	VROM (1991)	
opgelost, MILBOWA grenswaarde	0.04ug/l	van Dam (1992),	gecorrigeerd
opgelost, Achtergrond	0.003ug/l	Stortelder et al. (1989)	
sediment MILBOWA streefwaarde	1.48 mg/kgDW	VROM (1991) gecorrigeerd voor % org. lutum in HD/HV	stof en
sediment MILBOWA grenswaarde	0.59 mg/kgDW	VROM (1991) gecorrigeerd voor % org. lutum in HD/HV	stof en
sediment, Achtergrond	0.25 mg/kgDW	Stortelder et al. (1989)	
Interne NOEC D. polymorpha	10 mg/kgDW	Kraak 1992, Kraak mond. med.	
vis-consumptie	0.05 mg/kgDW	FAO, in Stortelder et al. (1989)	
voedselconc. vogels	0.35mg/kgDW	Romijn et al. (1991)	
interne nier NOEC vertebraten	120 mg/kgDW	geciteerd in Ma et al. (1991)	
laagste LC50 groenalgen	50 ug/l	AQUIRE (US-EPA)	
laagste LC50 diatomeeën	2.0 ug/l	AQUIRE (US-EPA)	
laagste LC50 zooplankton	0.1 ug/l	AQUIRE (US-EPA)	
laagste LC50 chironomiden	3.8 ug/l	AQUIRE (US-EPA)	
laagste LC50 oligochaeten	17.2 ug/l	AQUIRE (US-EPA)	
LOEC dreissena	9.0 ug/l	effect op filteract., Kraak et al. 1992	
laagste LC50 vissen	1.7 ug/l	AQUIRE (US-EPA)	

A1.2. lindaan

HC5	0.75 ug/l	van Dam (1992), HC5-50	
opgelost, MILBOWA streefwaarde	0.01 ug/l	VROM (1991)	
opgelost, MILBOWA grenswaarde	0.2 ng/l	VROM (1991)	
sediment MILBOWA streefwaarde	0.5 ug/kgDW	VROM (1991), gecorrigeerd voor een org. 5% in HD/HV	stof van
sediment, MILBOWA grenswaarde	0.025 ug/kgDW	VROM(1991), gecorrigeerd voor een % org. stof van 5% in HD/HV	
sediment, RIZA (1989)	0.013 mg/kgDW	Stortelder et al. (1989)	
vis-consumptie	0.20 mg/kgDW	FAO, in Stortelder et al. (1989)	
voedselconc. vogels	0.16 mg/kgDW	Romijn et al. (1991)	

NOEC <i>D. magna</i>	11.0 ug/l	Van de Meent et al. (1990)
NOEC vissen	8.8 ug/l	Van de Meent et al. (1990)
NOEC algen	150 ug/l	Van de Meent et al. (1990)

A2. Berekening normoverschrijdingen

Onzekerheidsberekeningen met het CATS-2 model gebeuren in een Monte-Carlo simulatieomgeving TREATSAM gekoppeld aan het simulatiepakket ACSL (Traas et al. 1993). Deze omgeving is aangepast aan het gebruik van het onzekerheidsanalysepakket UNCSAM (Janssen et al. 1992). Details over de gevolgde procedure worden in bovengenoemde rapporten beschreven.

De modeluitkomsten worden opgevangen in een file met de uitgang .SGN, een fileformaat van UNCSAM. Deze files worden ingelezen met de bij het RIVM-LWD ontwikkelde FORTRAN programma NOEC versie 1_4. Dit programma heeft als invoer een file met de namen van de modeluitkomsten geheten NOEC.IN, en de bijbehorende NOEC of norm of LC50 (zie sectie A.1). De overschrijding van deze normen wordt berekend en weggeschreven naar een file met de uitgang .PER. Voorbeelden van een invoerfile (noec.in) en een uitvoerfile (.PER) worden hieronder gegeven.

Invoerfile voor het programma NOEC1_4, ter berekening van overschrijdingspercentages

```
This is sed3_0, 30 dec. 1993 for Romijn norm.
MaxRun      1011
SGNFile     sed3_01a.sgn
OUTfile     3_01am.per
sDPhyt      niet          0.0
sDZoo       niet          0.0
sDChiro     niet          0.0
sDTubi      niet          0.0
sDDreiss    niet          0.0
sDCypr      niet          0.0
sDPerch     niet          0.0
sDEel      niet          0.0
sDDuck      niet          0.0
sDCorm      niet          0.0
aDSusTotOut niet          0.0
aXDSusTotOut StrNwaard    3.3
aXDissOut   MilbowaCorr  0.04
aXDissTotOut Milbowa     0.2
aXSedTotOut Milbowa     2.0
aXDissSedOut niet          0.0
aXDSusOMOut niet          0.0
aXDSusIMOut niet          0.0
aXSedOMOut  niet          0.0
aXDPhytOut  niet          0.0
aXDZooOut   niet          0.0
aXDChiroOut niet          0.0
aXTubiOut   niet          0.0
aDDreissOut Romijn      0.35
aXDCyprOut  FAO         0.05
aXDPerchOut FAO         0.05
aXDEelOut   FAO         0.05
aXDDuckOut  niet          0.0
aXDCormOut  niet          0.0
aXDFoodCormOut Romijn     0.35
aXDLiPerchOut NOECKid    120.0
aXDLiDuckOut NOECKid    120.0
aXDLiCormOut NOECKid    120.0
sDSusOMOut  niet          0.0
sDSusIMOut  niet          0.0
afDSedOMOut niet          0.0
afDSedIMOut niet          0.0
```

Uitvoerfile van het programma NOEC1_4, met berekende overschrijdingspercentages.

This is sed3_0, 30 dec. 1993 for Romijn norm!

Signal	Descrip	NOEC	Cumulative	Percentage
sDPhyt	niet	0.0000000000000000E+00	1011	100.000000000000
sDZoo	niet	0.0000000000000000E+00	1011	100.000000000000
sDChiro	niet	0.0000000000000000E+00	1011	100.000000000000
sDTubi	niet	0.0000000000000000E+00	1011	100.000000000000
sDDreiss	niet	0.0000000000000000E+00	1011	100.000000000000
sDCypr	niet	0.0000000000000000E+00	1011	100.000000000000
sDPerch	niet	0.0000000000000000E+00	1011	100.000000000000
sDEel	niet	0.0000000000000000E+00	1011	100.000000000000
sDDuck	niet	0.0000000000000000E+00	1011	100.000000000000
sDCorm	niet	0.0000000000000000E+00	1011	100.000000000000
aDSusTotOut	niet	0.0000000000000000E+00	1011	100.000000000000
aXDSusTotOut	StrNwaard	3.3000000000000000	1011	100.000000000000
aXDissOut	MilbowaCorr	4.0000000000000009E-02	0	0.0000000000000000E+00
aXDissTotOut	Milbowa	0.2000000000000000	0	0.0000000000000000E+00
aXSedTotOut	Milbowa	2.0000000000000000	1011	100.000000000000
aXDissSedOut	niet	0.0000000000000000E+00	1011	100.000000000000
aXDSusOMOut	niet	0.0000000000000000E+00	1011	100.000000000000
aXDSusIMOut	niet	0.0000000000000000E+00	1011	100.000000000000
aXSedOMOut	niet	0.0000000000000000E+00	1011	100.000000000000
aXDPhytOut	niet	0.0000000000000000E+00	1011	100.000000000000
aXDZooOut	niet	0.0000000000000000E+00	1011	100.000000000000
aXDChiroOut	niet	0.0000000000000000E+00	1011	100.000000000000
aXDtubiOut	niet	0.0000000000000000E+00	1011	100.000000000000
aXDDreissOut	Romijn	0.3500000000000001	4	0.3956478733926805
aXDCyprOut	FAO	5.0000000000000009E-02	98	9.693372898120673
aXDPerchOut	FAO	5.0000000000000009E-02	0	0.0000000000000000E+00
aXDEelOut	FAO	5.0000000000000009E-02	475	46.98318496538081
aXD DuckOut	niet	0.0000000000000000E+00	1011	100.000000000000
aXDCormOut	niet	0.0000000000000000E+00	1011	100.000000000000
aXD FoodCormOut	Romijn	0.3500000000000001	0	0.0000000000000000E+00
aXD LiPerchOut	NOECKid	120.00000000000000	0	0.0000000000000000E+00
aXD LiDuckOut	NOECKid	120.00000000000000	0	0.0000000000000000E+00
aXD LiCormOut	NOECKid	120.00000000000000	0	0.0000000000000000E+00
sDSusOMOut	niet	0.0000000000000000E+00	0	0.0000000000000000E+00
sDSusIMOut	niet	0.0000000000000000E+00	0	0.0000000000000000E+00
afDSedOMOut	niet	0.0000000000000000E+00	1011	100.000000000000
afDSedIMOut	niet	0.0000000000000000E+00	1011	100.000000000000

Bijlage B: Modelvergelijkingen en parameters.

B.1 Overzicht

B1.1 Versie, beheer

Voor dit rapport is gebruik gemaakt van verschillende CATS-2 versies, aangepast voor speciale doelen. De verschillen bestaan uit de wijze waarop invoer en uitvoer wordt gehanteerd en de formulering van sorptie van de toxische stof. De ecologische modelformulering is in alle versies gelijk. De modellen zijn geschreven in de taal ACSL (Mitchell & Gauthier 1993).

versie 3.01: gebruikt voor modelcalibratie op de RIZA data

versie 3.02: gebruikt voor het simuleren van de scenario's en het berekenen van risico's.

versie 3.03: gebruikt voor de linaan berekeningen.

De modellen inclusief invoerfiles worden beheerd door M.J. 't Hart, ECO/LWD.

B1.2 Nomenclatuur

Een consistente nomenclatuur vergroot de leesbaarheid en hanteerbaarheid van grote modellen, waardoor modelcode beter uit te wisselen en te onderhouden is. De in dit rapport gebruikte nomenclatuur is gebaseerd op conventies zoals gedocumenteerd door Traas & Aldenberg (1992) en De Nijs et al. (1993). De naamgeving gebruikt zowel onderkast- als bovenkast-letters om de leesbaarheid te vergroten, hoewel de gebruikt simulatietaal ACSL geen onderscheid maakt tussen onderkast en bovenkast.

Modeleenheden, voor zover eenduidig aan termen toe te kennen, staan tussen haken: [eenheid]

ALGEMENE NOMENCLATUUR CATS-2

----- EERSTE POSITIE -----

De eerste positie bepaalt of een term staat voor een constante of een expressie:

De volgende letters worden gebruikt voor constanten:

k = snelheidsconstante [1/y], [1/d]
 f = fractie [-]
 h = half verzadiging constante, bij opname voedsel/ toxische stof [gD/m³]
 of [gX/m³]
 i = constante, berekend uit andere constantes
 c = ALLE andere constantes worden voorafgegaan door een c

Overige eerste letters slaan niet op constantes, maar op expressies:

a = term voor hulpvergelijking bij beschrijving van processen
 p = proces term, beschrijft hoofdprocessen in differentiaalvergelijking
 d = afgeleide (derivative)
 s = toestandsvariabele (state variable)

----- TWEEDE POSITIE -----

De tweede positie bepaalt tot welke cyclus een term behoort:

D = Droog gewicht (DW)
 X = Xenobioticum (Cadmium, HCH, etc.)
 XD = Concentratie toxische stof (gX/gD)

Enige uitzondering: aXDiss of aXDissSed is conc. vrije toxicant.

----- **DERDE POSITIE** -----

De derde positie beschrijft het proces of eigenschap waarop de constante of expressie betrekking heeft.

----- **EIGENSCHAPPEN** -----

Rho = Dichtheid van bodem of sediment [kg/l]
 Theta = Porositeit van bodem of sediment [1.1-1]
 NOEC = NOEC, per soort of geextrapoleerd
 Func = functie voor bijv. dosis-effectrelatie
 Kow = log P_{oct}, partitiec coefficient water/octanol
 Trans = transport snelheid van organische stoffen [m/d]
 MW = Molecuul gewicht [g]
 Henry = Henry coefficient [-]
 Depth = diepte van water/sediment /bodem [m]
 DryDep = droge depositie [g/m²/y]
 WetDep = natte depositie [g/m²/y]
 Fat = vetgehalte, in combinatie met fDFat (perc. lichaamsvet)

----- **TWEDE EN DERDE POSITIE SAMEN: PROCESSEN** -----

DCons = Consumptie van biomassa
 DFilt = Filtreren van biomassa
 DAss = Assimilatie van biomassa
 DCarr = Maximaal gevonden populatie omvang (carrying capacity)
 DEges = Egestie van biomassa
 DMort = Sterfte van organismen
 DResp = Respiratie van organismen
 DMin = Mineralisatie van organische stof door microorganismen
 DSet = Bezinking van organische stof
 DBur = Begraving van sediment
 DFlow = Netto input van biomassa of zwevend stof via de stroom

Alle toxische stof processen gekoppeld aan normale biomassa processen worden voorafgegaan door X, inplaats van D:

XAss, XCons, XMort, XEges, XBur, XSet.

XFlow = Netto input van toxische stof (OM, IM of SM of Organismen)

XExp = Export van toxische stof (, , , ,)

Specifieke processen voor toxische stoffen zijn:

XUp = Opname van toxische stof uit het water door filtreer- of ventileeractiviteit en/of door opname via de huid.

XExcr = Excretie

XMeta = Metabolisering

XVol = Vervluchtiging

XDegr = Microbiële afbraak

XPhot = Fotolyse

XAds = Adsorptie

XDiff = Diffusie uit sediment naar water

----- **VIERDE POSITIE** -----

De vierde positie bepaalt tot welk compartiment in het model de term of expressie behoort:

SusOM = Zwevende organische stof

SusIM = Zwevende inorganische stof (vooral kleideeltjes) < 63 µm

SusSM = Zwevende stof > 63 µm

SusDOM = Opgelost organisch materiaal (zoals humuszuren)

SedOM = organische stof in sediment

SedIM = inorganische stof in sediment < 63 µm

SedSM = zand in sediment > 63 µm

Phyt = Fytoplankton (totaal van diatomeeen, groen- en blauwalgen)

Zoo = Zooplankton

Dreiss = Zoetwatermosselen, vnl., driehoeksmosselen (Dreissena polymorpha)

Chiro = Chironomidae, dansmuggen

Tubi = Tubificidae / Oligochaetae, wormpjes

Cypr = Witvis, voornamelijk karperachtigen (Cyprinidae)

Eel = Benthivore vis, zoals paling (Anguilla anguilla)

Perch = Roofvis, baars, snoekbaars,

Duck = Duikende, kuifeend (Aythya fuligula) en toppereend (Aythya marila)

Corm = Visetende vogels zoals: Aalscholver (Phalacrocorax carbo),

nonnetje (Mergus albellus)=(Smew),
 fuut (Podiceps cristatus=great crested grebe)
 en grote zaagbek (Mergus merganser=goosander)
 Sed = Sediment
 Diss = Opgelost in water (toxische stoffen (X), ev. humuszuren (D))
 DissSed = Opgelost in sediment-poriewater
 Air = Lucht (niet als toestandsvariabele)

----- **VIJFDE POSITIE** -----
 de vijfde positie geeft weer of een term of expressie tot modelinvoer of modeluitvoer behoort:

In = Model invoer: bijv. startconcentraties, startbiomassa's etc
 vaak in andere eenheden dan de startcondities.
 Out = Model uitvoer: concentraties, BCF'en, biomassa, percentages etc
 TotIn = Model invoer, totaal concentratie, bijv. alle X opgelost en
 inclusief zwevend gebonden aan OM, IM etc.
 TotOut = Model uitvoer, totaal concentratie, bijv. in water of sediment
 0 = Model startcondities in de standaard eenheid (gD/m² of gX/m²)

Voorbeelden:

cDImpSusIM = c, constante
 = D, Drooggewicht
 = Imp, Import term van
 = SusIM, zwevende klei [gDW.m⁻².y⁻¹]

 pXAssChiro = p, hoofdproces in differentiaalvergelijking
 = X, Toxische stof
 = Ass, assimilatie van
 = Chiro, chironomiden

 aXDTubiOut = a, hulpterm
 = XD, concentratie toxische stof
 = Tubi, tubificide wormen
 = Out, modeluitkomst, in gebruikerseenheid[mg/kg]

 sXDreiss = s, toestandsvariabele
 = X, hoeveelheid toxische stof
 = Dreiss, staat voor zoetwatermosselen

B1.3 Toestandsvariabelen

De toestandsvariabelen in het model bestaan uit 3 groepen:

- biomassa van functionele groepen en organisch detritus
- toxische stof in functionele groepen en in het milieu (abiotisch)
- massabalans controle

Functionele groepen in het model hebben de naam gekregen van de meest dominante vertegenwoordiger in het bestudeerde ecosysteem; dit vergroot de leesbaarheid van de modelcode.

De biomassa toestandsvariabelen zijn in de modelcode te herkennen aan het voorvoegsel 'sD' gevolgd door het compartiment (zie hierboven onder 'Vierde positie). Opgelost organisch materiaal (DOM) is geen toestandsvariabele, maar een constante. De toxische stof variabelen zijn te herkennen aan het voorvoegsel 'sX', gevolgd door het compartiment (zie hierboven onder 'Vierde positie). Indien de toxische stof een zwaar metaal is, bindt het in het model aan de fracties organisch zwevend stof (SusOM), kleine anorganische deeltjes (SusIM) en eventueel aan SusDOM (bijv. voor Cu). In het sediment wordt binding aan organisch en klein organisch materiaal verondersteld (SedOM en SedIM). Organische microverontreinigingen binden aan SusOM, SedOM en aan SusDOM.

B1.3 Processen

Processen die opgenomen zijn in het model zijn opgesomd in de nomenclatuur sectie, onder 'Tweede en derde positie'. De belangrijkste fluxen zijn opgenomen in fig. 1.

B2. Transport en belasting

Het ecosysteem wordt belast met de toxische stof middels natte en droge depositie (resp. cX_{WetDep} en cX_{DryDep} [$gX \cdot m^{-2} \cdot y^{-1}$]). De belangrijkste belasting is via aanvoer van water, inclusief toxische stof gebonden aan zwevend materiaal. De algemene belasting van het systeem is de som van aan- en afvoer. Voor zowel toxische stof als biomassa is deze gegeven door de formule hieronder, met als voorbeeld organisch zwevend stof (SusOM):

$$dDSusOM = \frac{cVol_{inp}}{cVol} \cdot cDSusOM_{inp} - \frac{cVol_{out}}{cVol} \cdot sDSusOM \quad (1)$$

met $dDSusOM$	afgeleide van de biomassa of toxische massa [gX of $gD \cdot m^{-2} \cdot y^{-1}$]
$cVol_{inp}$	wateraanvoer, op jaarbasis gelijk aan afvoer $cVol_{out}$
$cVol$	Totale volume van het gemodelleerde systeem [m^3]
$cDSusOM_{inp}$	hoeveelheid opgelost materiaal bij invoer, omgerekend naar m^{-2} [gX of $gD \cdot m^{-2}$]
$sDSusOM$	toestandsvariabele, berekend in het gemodelleerde compartiment [gX of $gD \cdot m^{-2}$]

Deze formule is gebruikt voor het berekenen van de aanvoer van zwevend stof (3 fracties) en van toxische stof (opgelost, en gebonden aan zwevend stof).

B3 Processen in het water

B3.1 sedimentatie

Het zwevend stof is onderverdeeld in drie fracties: SusOM (organisch), SusIM (anorganisch, fijn), SusSM (anorganisch, grof). In CATS is gekozen voor een netto sedimentatie vergelijking. De flux van deeltjes naar het sediment wordt berekend met de volgende formule:

$$pDSetSusOM = \frac{cDSetSusOM}{cDepthW} \cdot sDSusOM \quad (2)$$

met $pDSetSusOM$	sedimentatie van organisch zwevend stof (detritus) [$gD \cdot m^{-2} \cdot y^{-1}$]
$cDSetSusOM$	sedimentatiesnelheid van SusOM [$m \cdot y^{-1}$]
$cDepthW$	diepte

Dezelfde formule wordt gebruikt voor SusIM en SusSM. De sedimentatie wordt gecalibreerd op de sedimentsamenstelling (in %organische stof en klei) zoals weergegeven

in fig. 3). De flux van de toxische stof naar het sediment is uiteraard gekoppeld aan de sedimentatie van zwevend stof. Door de concentratie van het zwevend stof te vermenigvuldigen met de sedimentatieflux van detritus (SusOM), vinden we:

$$pXSetSusOM = pDSetSusOM \cdot aXDSusOM \quad (3)$$

met $pXSetSusOM$ sedimentatie van toxische stof gebonden aan org. zwevend stof [$\text{gX} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{y}^{-1}$]
 $aXDSusOM$ concentratie toxische stof in het SusOM [$\text{gX} \cdot \text{gD}^{-1}$]

Voor organische MV's blijft het hierbij. Voor zware metalen wordt op analoge wijze de flux voor toxische stof gebonden aan fijn zwevend stof (SusIM) berekend.

B3.2 Sorptie van toxische stoffen

Toxische stoffen kunnen binden aan organische en anorganische bestanddelen in het water. In werkelijkheid bestaat er een grote hoeveelheid evenwichten met verschillende bestanddelen in het water. Concentraties toxische stof in het water zullen i.h.a. laag zijn, zodat uitgegaan is van lineaire sorptie. De gekozen evenwichtsformulering (De Nijs et al. 1993) is echter eenvoudig aan te passen voor niet-lineaire binding. Sorptieconstanten voor binding van cadmium aan org. zwevend stof ($cXAdsOM$) en fijn zwevend stof ($cXAdsIM$) worden berekend op basis van CEC, pH en chloride gehalte. In het sediment worden dezelfde sorptieconstanten gebruikt.

De sorptieconstante voor binding van lindaan aan organische stof ($cXadsOM$) is geschat op basis van de octanol-water partiticoëfficiënt. De sorptieconstante van lindaan aan opgeloste organische stof ($cXadsDOM$) is geschat als een vierde van $cXadsOM$. De sorptieflux is het verschil tussen de evenwichtsconcentratie en de actueel gebonden concentratie:

$$pXSorpSusOM = kXSorpDet \cdot (aXEqSusOM - sXSusOM) \quad (4)$$

met $pXSorpSusOM$ de evenwichtsflux [$\text{gX} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{y}^{-1}$], $kXSorpDet$ de snelheidsconstante van het proces [y^{-1}], $aXEqSusOM$ de evenwichtsconcentratie en $sXSusOM$ de actuele concentratie [$\text{gX} \cdot \text{m}^{-2}$]. De evenwichtsconcentratie wordt eerst uitgerekend:

$$aXEqSusOM = cXAdsOM \cdot aXDiss \cdot sDSusOM \quad (5)$$

waarin $aXDiss$ de concentratie opgeloste toxische stof is [$\text{gX} \cdot \text{m}^{-3}$] en $sDSusOM$ de hoeveelheid zwevend stof [$\text{gD} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{y}^{-1}$].

B3.3 Vervluchtiging

Vervluchtiging is in het model opgenomen volgens het twee-laags principe (zie verder US-EPA 1985). Hiertoe zijn de volgende parameters gedefinieerd:

$cXHenry$ henry coefficient [-]
 $cXDiffWater$ diffusiesnelheid in water [$\text{m} \cdot \text{y}^{-1}$]

$cXDiffAir$ diffusiesnelheid in lucht [$m \cdot y^{-1}$]

B4 Processen in het sediment

B4.1 Begraving

De sedimentlaag in CATS-2 is constant van dikte. De dikte van de laag komt ongeveer overeen met de habitat van benthische organismen. Er sedimenteert echter materiaal, zodat de laag van boven wordt aangevuld. Omdat de laagdikte echter constant is, zal er aan de 'onderzijde' sediment begraven worden. Dit proces is gebaseerd op twee principes.

Allereerst is de begraving flux in steady-state de netto aanvoer minus de afvoer (voor alle sedimentfracties), als voorbeeld voor org. stof in het sediment:

$$sDSed\dot{O}M = SedSusOM - \gamma \cdot sDSedOM \quad (6)$$

Waarin $SedSusOM$ de netto toevoer is (sedimentatie - respiratie etc.), γ de begraafsnelheid [y^{-1}] en $sDSedOM$ de hoeveelheid org.stof in het sediment. Daarnaast geldt dat de laagdikte $cDepthSed$ [m] uit te rekenen is door aan elke fractie een dichtheid toe te kennen:

$$cDepthSed = \frac{sDSed\dot{O}M}{\rho_{OM}} + \frac{sDSed\dot{I}M}{\rho_{IM}} + \frac{sDSed\dot{S}M}{\rho_{SM}} \quad (7)$$

waarin ρ de dichtheid is van de verschillende fracties. Uit bovenstaande twee vergelijkingen kan dan de begraafsnelheid γ worden afgeleid:

$$\gamma = \frac{\frac{SedSusOM}{\rho_{OM}} + \frac{SedSusOM}{\rho_{IM}} + \frac{SedSusSM}{\rho_{SM}}}{\frac{sDSedOM}{\rho_{OM}} + \frac{sDSedIM}{\rho_{IM}} + \frac{sDSedSM}{\rho_{SM}}} \quad (8)$$

Deze kan nu ingevuld worden in formule 6.

B4.2 Evenwichten

Evenwichten in het sediment zijn op dezelfde wijze geformuleerd als voor het zwevend stof, met dezelfde sorptieconstanten, tenzij deze uit onderzoek naar sorptie in sediment bekend zijn.

B5 Algen

De formulering van algengroei is afgeleid van plantengroei in CATS-1. Het algemene

groeimodel is weergegeven door:

$$\frac{dDPhyt}{dt} = pDPrimProd - pDCons - pDRespPhyt - pDMortPhyt \quad (9)$$

met $pDPrimProd$	primaire productie	[gDW/m ² /y]
$pDCons$	geconsumeerde algen door zooplankton etc.	„
$pDRespPhyt$	gerespireerde biomassa	„
$pDMortPhyt$	sterven van phytoplankton	„

Primaire productie is gemodelleerd volgens een aanpassing van de logistische groei voor planten (Traas & Aldenberg 1992).

$$\begin{aligned} pDPrimProd &= aDGrMaxPhyt \cdot fDEnvPhyt \cdot aDEnvPhyt \\ pDMortPhyt &= kDMortPhyt \cdot sDPhyt + (1 - fDEnvPhyt) \cdot aDEnvPhyt \end{aligned} \quad (10)$$

met $aDGrMaxPhyt$	algengroei	[gD.m ⁻² .y ⁻¹]
met $fDEnvPhyt$	fractie van de logistische groei correctie	[-]
$aDEnvPhyt$	logistische groeicorrectie	[gD.m ⁻² .y ⁻¹]
$sDPhyt$	algenbiomassa	[gDW/m ²]
$kDMortPhyt$	sterftesnelheid van algen	[y ⁻¹]

De fractie $fDEnvPhyt$ bepaalt hoeveel van de logistische correctie $DEnvCr$ wordt toegewezen aan groeiremming en welk deel aan additionele sterfte (Traas & Aldenberg 1992, bijlage C). Respiratie ($pDRespPhyt$) wordt beschouwd als een eerste orde proces, met snelheidsconstante $kDRespPhyt$ [y⁻¹]:

$$pDRespPhyt = kDRespPhyt \cdot sDPhyt \quad (11)$$

B6 Microorganismen

Microorganismen zijn in CATS-2 niet als toestandsvariabele opgenomen, hun activiteit is echter op een aantal manieren in het model opgenomen. Allereerst is de afbraak van organisch materiaal in water als eerste orde proces opgenomen:

$$pDMinSusOM = kDMinSusOM \cdot sDSusOM \quad (12)$$

waarin $kDMinSusOM$ de mineralisatiesnelheid van organisch zwevend stof is [y⁻¹]. In het sediment wordt dit op gelijke wijze geformuleerd. Ten tweede wordt de microbiologische afbraak van organische MV's eveneens als eerste orde proces gemodelleerd, waarbij de microben alleen de opgeloste stof kunnen afbreken:

waarin $kXDegrSed$ de snelheidsconstante is voor afbraak in het sediment [y⁻¹], en $sXDissSed$ de opgeloste toxicant [gX . m⁻²]. In het water wordt dit op gelijke wijze

$$pXDegrDissSed = kXDegrSed \cdot sXDissSed \quad (13)$$

geformuleerd.

B7 Groei en voedselbeperking

B7.1 Logistische groei

Alle functionele groepen in het model groeien volgens een logistische groeivergelijking, aangepast voor een sluitende massabalans van zowel biomassa als toxische stoffen. De afleiding en formulering van deze vergelijking is eerder beschreven (Traas & Aldenberg 1992, bijlage C).

B7.2 Voedselbeperking

Voedselbeperking is voor alle niet-filtrerende organismen gemodelleerd als een Monod functie (Traas & Aldenberg 1992, bijlage B).

B7.3 Filtreerfuncties voor filterfeeders.

De afleidingen hieronder zijn afkomstig uit een ander document en zijn onvertaald gelaten.

Filtration rate has been expressed as follows (Janse & Aldenberg 1990):

$$DFilt = GMax \cdot \frac{hFilt}{hFilt + DFood} \quad (14)$$

with *Filt* specific filtration rate of organic material [$m^3/(gDW \cdot y)$]
GMax maximum specific filtration rate [$l/(mgC \cdot y)$]
hFilt half saturating food concentration [mgC/l]

The units in this equation are expressed per volume, but the states in the present model are expressed per m^2 . Filter feeders filter a certain volume per gDW per unit time, therefore *GMax* should have the unit [$m^3/gDW/y$]. To match units, the concentration of food (i.e. *sDAgae*) should be expressed in [gDW/m^3] by dividing algal biomass by water depth:

$$Filt = GMax \cdot \frac{hFilt}{hFilt + \frac{sDAgae}{DepthW}} \quad (15)$$

with *DepthW* water depth [m]
hFood half saturation constant [$gDFood/m^3$]
GMax maximum specific filtration rate [$m^3 \cdot gDWFilt^{-1} \cdot y^{-1}$]

The unit of the right side of the equation is now $[m^3(\text{water}) \cdot gD^{-1} \cdot y^{-1}]$. We would like to express filtration in terms of $gD\text{Food}/(gDW\text{Filt} \cdot y)$.

To achieve this, we expand the equation thus:

$$DFilt = GMax \cdot \frac{hFilt \cdot \frac{sDAlgae}{DepthW}}{hFilt + \frac{sDAlgae}{DepthW}} \quad (16)$$

with $DFilt$ specific food intake $[gDW \cdot gDW^{-1} \cdot y^{-1}]$.

now, the 2nd part of the right hand side of the equation has unit $[gD\text{Food} \cdot m^{-3}]$. We can simplify the equation to

$$DFilt = GMax \cdot \frac{hFilt \cdot (sDAlgae)}{hFilt \cdot (DepthW) + sDAlgae} \quad (17)$$

If food consists of several sources, e.g. algae and suspended organic matter (SOM), the specific filtration rates can be separated thus:

:

$$DFiltAlgae = GMax \cdot \frac{hFilt \cdot sDAlgae}{h \cdot (DepthW) + sDAlgae + sDDOM} \quad (18)$$

and for SOM:

$$DFiltDOM = GMax \cdot \frac{hFilt \cdot sDDOM}{hFilt \cdot (DepthW) + sDDOM + sDAlgae} \quad (19)$$

B7.4 Respiratie- and assimilatiesnelheden

Respiratie en assimilatiesnelheden zijn geschat m.b.v. lichaamsgrootte-relaties (Peters 1983), zie tabel B1. Voor filtrerende organismen wordt de consumptie in het model berekend (zie 7.3)

Tabel B1. Respiratie- en groeisnelheden geschat volgens Peters (1983).

	gem. gewicht (FW)	kDResp[y ⁻¹]	kDCons [y ⁻¹]
sDZoo	50-70 µg	20-50	
sDChiro	1 mg	75	170
sDTubi	1 mg	80	190
sDDreiss	50-200 mg	5-10	
sDCypr	300-700 g	0.7-1.3	4-6
sDPerch	300-500g	0.9	4.5
sDEel	200-250g	0.9	35-50
sDDuck	500-900 g	20	35-50
sDCorm	2.3 kg	15	20-40

B7.5 Natuurlijke sterfte

Natuurlijke sterfte is gemodelleerd als een eerste orde proces voor alle functionele groepen:

$$pDMortQ = kDMortQ \cdot sDQ \quad (20)$$

met $kDMortQ$ sterfte van functionele groep Q [y⁻¹]
 sDQ biomassa groep Q [gD.m⁻²]

B8 Toxische stoffen in organismen

B8.1.1 Opname uit voedsel

De toxische stof wordt met een bepaalde efficiëntie uit het voedsel opgenomen, en het niet-geassimileerde deel wordt uitgescheiden:

$$\begin{aligned} XConsQ &= DConsQ \cdot XDFoodQ \\ XAssQ &= XConsQ \cdot fXAssQ \\ XEgesQ &= XConsQ - XAssQ \end{aligned} \quad (21)$$

met	fX_{AssQ}	assimilatie efficiëntie [-] van de toxicant
	X_{ConsQ}	geconsumeerde hoeveelheid toxicant [$gX \cdot m^{-2} \cdot y^{-1}$]
	X_{DFoodQ}	concentratie toxische stof in het voedsel [$gX \cdot gD^{-1}$]
	X_{AssQ}	toxicant assimilatie [$gX \cdot m^{-2} \cdot y^{-1}$]
	X_{EgesQ}	toxicant egestie [$gX \cdot m^{-2} \cdot y^{-1}$]

B8.1.2 Opname uit water

De hieronder weergegeven afleidingen zijn afkomstig uit een ander document en zijn onvertaald gelaten.

Monod saturation

Toxicant uptake from water can be modelled as type II Monod saturation kinetics, taking uptake by Fish as an example:

$$X_{UptakeFish} = kX_{UpFish} \cdot \frac{X_{Diss}}{hX_{UpFish} + X_{Diss}} \cdot sDFish \quad (22)$$

with	X_{Diss}	Toxicant conc in water [gX/m^3]
	kX_{UpFish}	specific uptake rate [$gX \cdot gDW^{-1} \cdot y^{-1}$]
	hX_{UpFish}	Toxicant concentration in water at which kX_{UpFish} is half-maximal [gX/m^3]
	$sDFish$	Fish biomass [gDW/m^2]

The uptake parameters (kX_{UpFish} , hX_{UpFish}) are calibrated on a Bioaccumulation Factor (BAF) determined in a similar ecosystem. A more detailed mechanism for toxicant uptake from water is to model the uptake over gills, as a result of ventilation or filter feeding. At the moment, uptake by fish is modelled as above for simplicity. Since filter feeding functions already were used for food uptake, toxicant uptake by filter feeders is modelled similarly.

Uptake by filtering

In the derivation of specific filtration rate for filter feeders with one food source (algae), the second formula was

$$Filt = GMax \cdot \frac{hFilt}{hFilt + \frac{sD_{Algae}}{DepthW}} \quad (23)$$

with	$DepthW$	water depth [m]
	$hFood$	half saturation constant [$gDFood/m^3$]

G_{Max} maximum specific filtration rate
[m³ · gDWFilt⁻¹ · y⁻¹]

the unit of the right side of the equation is now [m³(water) · gD⁻¹ · y⁻¹]. However, we want to have an expression for specific toxicant uptake, in terms of [gX/(gDWFilt)].

To achieve this unit, we multiply by [gX/m³], i.e. the mass of dissolved toxicant divided by depth which yields the concentration, i.e. $s_{XDiss}/DepthW$:

$$XFilt = G_{Max} \cdot \frac{h_{Filt} \cdot \frac{s_{XDiss}}{DepthW}}{h_{Filt} + \frac{s_{DAlgae}}{DepthW}} \quad (24)$$

now, the right hand side of the equation has unit [gX · gDWFilt⁻¹ · y⁻¹].

We can simplify the equation to

$$XFilt = G_{Max} \cdot \frac{h_{Filt} \cdot (s_{XWater})}{h_{Filt} \cdot (DepthW) + s_{DAlgae}} \quad (25)$$

To know how much toxicant is taken up by the organism, the specific filtration rate [gX · gDW⁻¹ · y⁻¹] is multiplied by the biomass of the filter feeder [gDW · m⁻²] and the assimilation efficiency over the gills:

$$p_{XAssFilt} = XFilt \cdot s_{DFilt} \cdot f_{XUpF} \quad (26)$$

with

$p_{XAssFilt}$	toxicant assimilation by filter feeder [gX/m ² /y]
$XFilt$	specific toxicant uptake rate for toxicant [gX/gDW/y]
s_{DFilt}	biomass of filter feeder (state variable) [gDW/m ²]
f_{XUpF}	toxicant assimilation efficiency over gills [-]

B8.1.3 Opname uit sediment

In CATS-2 kunnen benthische organismen ook blootgesteld worden via het poriewater in het sediment. Deze opname is op dezelfde wijze gemodelleerd als opname uit water volgens een type II Monod vergelijking.

B8.2 Excretie, metabolisering

Als een functionele groep de toxische stof heeft opgenomen, kan hij die kwijtraken door de stof te excreteren of te metaboliseren. Bij excretie van zware metalen wordt het metaal, gebonden aan faeces, weer toegevoegd aan een detritus-pool. Persistente organische stoffen

zijn in het algemeen slecht wateroplosbaar. Door verschillende metabolische modificaties neemt de wateroplosbaarheid toe, waarbij er metabolieten ontstaan. Dit proces zorgt voor een permanent verlies van de toxische stof uit het systeem.

$$\begin{aligned} pXExcrQ &= kXExcrQ \cdot sXQ \\ pXMetaQ &= kXMetaQ \cdot sXQ \end{aligned} \quad (27)$$

met $XExcrQ$ excretie van toxische stof [$\text{gX} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{y}^{-1}$]
 $kXExcrQ$ excretiesnelheid [y^{-1}]
 $kXMetaQ$ metaboliseringsnelheid [y^{-1}]

B8.3 Sterfte en predatie

Door natuurlijke sterfte en predatie wordt er toxische stof aan de functionele groep onttrokken. Beide processen zijn gekoppeld aan de bijbehorende biomassa flux:

$$\begin{aligned} pXMortQ &= aXDQ \cdot dMortQ \\ pXPredQ &= aXDQ \cdot dPredQZ \end{aligned} \quad (28)$$

met $aXDQ$ concentratie toxische stof in groep Q [$\text{gX} \cdot \text{gD}^{-1}$]
 $dMortQ$ sterfte flux van groep Q [$\text{gX} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{y}^{-1}$]
 $dPredQZ$ predatie flux van groep Q naar groep Z [$\text{gX} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{y}^{-1}$]

Bijlage C: Parameter-en calibratieverantwoording

C1. Venstercalibratie

Hieronder zijn de parameterranges gegeven (tabel c1) van modeluitkomsten die gebruikt zijn voor venstercalibratie. Verschillende categorieën modeluitkomsten zijn gebruikt ter calibratie van het model:

- Hoeveelheid zwevend stof en biomassa's van functionele groepen (gDW/m²). Om concentraties te vinden (m³) moet gedeeld worden door waterdiepte (m) of sedimentdiepte (0.1m)
- Percentage organisch materiaal en klei in het sediment (afDSedOM en afDSedIM).
- concentraties toxische stof (alleen voor cadmium) (ug/l of mg/kgDW)
- bioconcentratiefactoren (zowel voor cadmium als lindaan) (dimensieloos)

Tabel c1 Parameterranges ter calibratie van CATS-2

Variabele	laag	hoog	referenties
afDSedOM	1.0D0	1.4D1	MIVEOS database, RIZA 1982
afDSedIM	1.0D1	8.8D1	MIVEOS database, RIZA 1982
sDSedOM	2.0D0	9.0D4	MIVEOS database, RIZA 1982
sDSedIM	5.0D0	9.0D4	MIVEOS database, RIZA 1982
sDPhyt	5.0D0	4.1D1	WL (1992), De Nijs et al. (1993)
sDZoo	1.0D-1	2.0D0	RIZA (1991), WL (1992)
sDDreiss	0.1D0	6.0D0	Dorgelo & Van der Kamp (1992)
sDChiro	0.5D-2	1.0D1	AquaSense (1993)
sDTubi	5.0D-1	2.0D1	Van Hemelrijk (1993), RIZA (1993)
sDCypr	1.0D0	1.25D1	Van Hemelrijk (1993)
sDEel	5.0D-2	2.5D0	Van Hemelrijk (1993)
sDPerch	5.0D-2	2.5D0	Van Hemelrijk (1993)
sDDuck	1.0D-3	2.5D-1	Van Hemelrijk (1993), WL 1992
sDCorm	5.0D-4	1.25D-1	Van Hemelrijk (1993), WL 1992
De hierna volgende ranges zijn alleen gebruikt voor de cadmium calibratie			
aBCFDreissOut	1.5D1	5.0D4	Kraak Hfdst. 4 (1992)
aBCFPhytOut	1.5D1	9.0D6	Dorgelo & van der Kamp (1982), Ferard et al. (1983), Truhaut et al. (1980)
aXDissOut	3.0D-4	9.0D-1	WAKWAL database, RIZA
aXSedTotOut	1.0D-2	9.0D2	MIVEOS database, RIZA 1982
aBCFZooOut	3.2D1	3.0D6	WL (1992), Dorgelo & van der Kamp (1992)
aBCFChiroSedOut	1.0D-2	1.0D1	Timmermans Hfdst. 3 (1991)
aBCFTubiSedOut	2.0D-2	5.0D1	Timmermans Hfdst. 3 (1991)
aXDEelOut	1.0D-2	3.0D-1	Romijn et al. (1991a), Dorgelo & van der Kamp (1992)
aXDLiDuckOut	1.0D-4	1.0D2	Dorgelo & van der Kamp (1992), De Kock & Bowmer (1993)

C2. Parameterranges

Het CATS-2 model is gecalibreerd met behulp van venstercalibratie (zie hfdst 4, 5). De parameterranges die na calibratie overblijven worden hieronder weergegeven voor scenario 1.

TABEL C1: karakterisering van de modelparameters voor scenario 1

```
#1 31-Dec-93 13:46:55
#2 UNCSAM-BASICS [RIVM] Version 1.0-1.00, [Jun 20, 1992]
#3 Copyright (c) RIVM/CWM, 1991
```

```
Basic Statistics of file: 3_01s.bam
Title: This is CATS sed3_0, uncertainty analysis
```

parameter	mean	50 perc.	st. dev.	c.v.	minimum	maximum
kDMinSusOM	5.01161E+00	4.96985E+00	1.43875E+00	2.87084E-01	2.50454E+00	7.49943E+00
cDSusOMIn	1.51182E+01	1.51315E+01	9.18409E-01	6.07487E-02	1.30393E+01	1.69800E+01
cDSusIMIn	2.62872E+01	2.62628E+01	7.08286E+00	2.69441E-01	1.03893E+01	4.49862E+01
cDSusSMIn	2.49867E+01	2.49909E+01	5.66703E-01	2.26802E-02	2.40022E+01	2.59997E+01
cDSetSusOM	1.25605E+02	1.25694E+02	1.45598E+01	1.15917E-01	1.00018E+02	1.49976E+02
cDSetSusIM	6.03464E+01	6.04131E+01	1.74022E+01	2.88371E-01	3.01683E+01	8.99882E+01
cDSetSusSM	5.99830E+01	5.99624E+01	5.78199E-01	9.63937E-03	5.90005E+01	6.09986E+01
cDummy	1.50869E+00	1.51642E+00	2.86742E-01	1.90060E-01	1.00015E+00	1.99903E+00
cInFlow	1.00226E+11	9.51804E+10	3.63699E+10	3.62878E-01	4.00739E+10	2.22790E+11
cOutFlow	8.77931E+10	8.39481E+10	3.51421E+10	4.00283E-01	2.13883E+10	2.35176E+11
kXSorpDet	2.70926E+02	2.71556E+02	5.33107E+01	1.96772E-01	1.80003E+02	3.64419E+02
cpH	7.89096E+00	7.89207E+00	1.94659E-01	2.46686E-02	7.34742E+00	8.38566E+00
cCl	1.59777E+02	1.56394E+02	6.26344E+01	3.92012E-01	4.13141E+01	3.87838E+02
cXWetDep	3.00371E-04	3.00681E-04	2.89838E-05	9.64933E-02	2.50262E-04	3.49996E-04
cXDryDep	1.50093E-04	1.49839E-04	1.43798E-05	9.58058E-02	1.25049E-04	1.74924E-04
cDummy	3.99776E-01	3.99649E-01	5.82001E-03	1.45582E-02	3.90008E-01	4.09994E-01
kDMinSedOM	5.28643E-01	5.13262E-01	2.60526E-01	4.92821E-01	1.02983E-01	9.99604E-01
DSedOMIn	1.75859E+03	1.77159E+03	4.26283E+02	2.42400E-01	1.00368E+03	2.49914E+03
cDSedIMIn	9.00924E+03	9.00413E+03	1.15712E+03	1.28437E-01	7.00193E+03	1.09984E+04
cThetaSed	7.01683E-01	7.02812E-01	8.73213E-02	1.24445E-01	5.50064E-01	8.49731E-01
cRhoSedOM	1.30162E+00	1.30374E+00	5.83672E-02	4.48420E-02	1.20007E+00	1.39998E+00
cRhoSedIM	1.95078E+00	1.94856E+00	1.46131E-01	7.49089E-02	1.70031E+00	2.19986E+00
cRhoSedSM	1.69697E+00	1.70104E+00	1.72919E-01	1.01899E-01	1.40108E+00	1.99945E+00
cDepthSed	1.00069E-01	1.00109E-01	5.66222E-03	5.65833E-02	9.00097E-02	1.09983E-01
cTortSed	1.20058E+00	1.20175E+00	5.70937E-02	4.75550E-02	1.10049E+00	1.29974E+00
kXLeachDissS	9.99859E-01	9.98517E-01	5.81739E-02	5.81821E-02	9.00032E-01	1.09983E+00
cXDiffSed	3.69961E-02	3.69720E-02	5.77402E-04	1.56071E-02	3.60017E-02	3.79978E-02
cXSedTot In	2.54961E+00	2.52844E+00	1.04316E+00	4.09143E-01	6.09721E-01	6.23306E+00
kDGrPhyt	1.07930E+02	1.07942E+02	1.16903E+00	1.08314E-02	1.06006E+02	1.09994E+02
cDPhyt In	2.00072E+01	1.99912E+01	5.86374E-01	2.93082E-02	1.90003E+01	2.09998E+01
cDCarrPhyt	3.56204E+01	3.57183E+01	3.18574E+00	8.94357E-02	3.00092E+01	4.09621E+01
kDRespPhyt	5.23788E+01	5.21934E+01	7.19167E+00	1.37301E-01	4.00355E+01	6.49989E+01
kDMortPhyt	3.50039E+01	3.50244E+01	2.88555E+00	8.24351E-02	3.00101E+01	3.99934E+01
fDEnvPhyt	4.99222E-01	5.01081E-01	1.14896E-01	2.30151E-01	3.00447E-01	6.99758E-01
fDAutoPhyt	2.14878E-01	2.16628E-01	6.66017E-02	3.09951E-01	1.00077E-01	3.29995E-01
kXUpPhyt1	4.70268E-01	4.70353E-01	1.15073E-02	2.44696E-02	4.50004E-01	4.89933E-01
hXUpPhyt1	3.34073E-01	3.31256E-01	6.51078E-02	1.94891E-01	2.24108E-01	4.47829E-01
kXUpPhyt2	1.10886E+00	1.10627E+00	9.94161E-02	6.26013E-02	9.90195E-01	1.22998E+00
hXUpPhyt2	7.29537E+00	7.29410E+00	6.72465E-01	1.33299E-01	5.62232E+00	8.89891E+00
cXDPhyt In	5.38659E-01	5.28398E-01	2.59929E-01	4.82548E-01	1.01597E-01	9.99492E-01
kDFiltMaxZoo	3.74636E+02	3.75357E+02	4.20666E+01	1.12287E-01	3.00056E+02	4.49749E+02
hDFiltZoo	4.19763E-01	4.19018E-01	4.62875E-02	1.10270E-01	3.40227E-01	4.99970E-01
fDAssZooPhyt	5.00682E-01	5.00413E-01	5.74073E-02	1.14658E-01	4.00239E-01	5.99981E-01
fDAssZooDet	5.02331E-01	5.04368E-01	5.84605E-02	1.16378E-01	4.00013E-01	5.99802E-01
kDRespZoo	4.46427E+01	4.42036E+01	8.61293E+00	1.92931E-01	3.00356E+01	5.99813E+01
kDMortZoo	3.02703E+01	3.04154E+01	5.62916E+00	1.85963E-01	2.00183E+01	3.99347E+01
cdZooIn	8.50165E-01	8.50621E-01	2.93610E-02	3.45356E-02	8.00020E-01	8.99859E-01
cDCarrZoo	1.79662E+00	1.79430E+00	1.15891E-01	6.45049E-02	1.60014E+00	1.99980E+00
fXAssZoo	1.39751E-02	1.39396E-02	2.32790E-03	1.66575E-01	1.00031E-02	1.79893E-02
fXUpZoo	1.45468E-02	1.47653E-02	7.89882E-03	5.42994E-01	1.02598E-03	2.79991E-02
kXExcrZoo	1.06357E+01	1.07274E+01	5.47773E+00	5.15031E-01	1.00507E+00	1.99948E+01
cXDZooIn	2.50538E+00	2.50637E+00	2.85646E-01	1.13941E-01	2.00070E+00	2.99981E+00
cDFiltMaxDre	3.56146E+01	3.57730E+01	8.17728E+00	2.29605E-01	2.10245E+01	4.99998E+01
hDFiltDreiss	3.29332E+00	3.30331E+00	1.56206E+00	4.74312E-01	5.12860E-01	5.99194E+00
fDAssDreissP	7.01431E-01	7.02042E-01	5.80957E-02	8.28245E-02	6.00076E-01	7.99993E-01
fDAssDreissD	4.99457E-01	4.98423E-01	5.77949E-02	1.15716E-01	4.00063E-01	5.99887E-01
kDRespDreiss	1.04605E+01	1.04937E+01	2.59561E+00	2.48135E-01	6.00314E+00	1.49999E+01
kDMortDreiss	2.17805E+00	2.16646E+00	1.06356E+00	4.88307E-01	3.12673E-01	3.99027E+00
cDDreissIn	1.99929E+00	1.99966E+00	5.90531E-02	2.95371E-02	1.90003E+00	2.09900E+00
cDCarrDreiss	4.27335E+00	4.29457E+00	7.23238E-01	1.69244E-01	3.00420E+00	5.49801E+00
fXAssDreiss	1.04835E-02	1.03853E-02	5.47536E-03	5.22286E-01	1.00613E-03	1.99552E-02
fXUpDreiss	2.73046E-02	2.72645E-02	1.30594E-02	4.78287E-01	5.05013E-03	4.99963E-02
kXExcrDreiss	5.51546E+00	5.51527E+00	2.59515E+00	4.70524E-01	1.00220E+00	9.99601E+00
cXDreissIn	2.50642E+00	2.51133E+00	2.86036E-01	1.14121E-01	2.00001E+00	2.99785E+00
fDAssChiroPh	7.48988E-01	7.49073E-01	2.91840E-02	3.89646E-02	7.00011E-01	7.99757E-01
fDAssChiroDe	4.99710E-01	5.02143E-01	5.86896E-02	1.17447E-01	4.00038E-01	5.99939E-01
kDAssChiro	1.44871E+02	1.44492E+02	1.47027E+01	1.01488E-01	1.20021E+02	1.69987E+02
kDRespChiro	7.96379E+01	7.95495E+01	1.13830E+01	1.42934E-01	6.00374E+01	9.99864E+01
kDMortChiro	6.03637E+00	6.04240E+00	2.31434E+00	3.83399E-01	2.00587E+00	9.99770E+00
hDConsChiro	1.19882E+00	1.19597E+00	5.81091E-02	4.84719E-02	1.10004E+00	1.29994E+00
cDChiroIn	4.42432E+00	4.38258E+00	2.03102E+00	4.59058E-01	1.00224E+00	7.99757E+00
cDCarrChiro	6.76128E+00	6.73083E+00	1.01560E+00	1.50208E-01	5.00092E+00	8.49914E+00
fXAssChiro	4.00443E-03	4.01344E-03	1.73620E-03	4.33569E-01	1.00474E-03	6.99711E-03
kXUpChiro	1.05010E-05	1.05068E-05	2.91555E-07	2.77646E-02	1.00003E-05	1.09995E-05
hXUpChiro	1.49757E-02	1.49881E-02	2.86739E-03	1.91470E-01	1.00250E-02	1.99850E-02
kXExcrChiro	7.95340E+00	7.82887E+00	4.03120E+00	5.06852E-01	1.01827E+00	1.49871E+01
cXDChiroIn	5.48685E+00	5.44040E+00	1.45531E+00	2.65236E-01	3.00151E+00	7.99852E+00
fDAssTubi	5.00636E-01	5.02582E-01	5.77515E-02	1.15356E-01	4.00095E-01	5.99957E-01
kDAssTubi	1.30252E+02	1.30443E+02	1.15869E+01	8.89570E-02	1.10029E+02	1.49969E+02
kDRespTubi	6.47530E+01	6.49562E+01	8.74104E+00	1.34991E-01	5.00195E+01	7.99860E+01
kDMortTubi	6.08710E+00	6.20764E+00	2.29012E+00	3.76224E-01	2.01041E+00	9.99877E+00
hDConsTubi	1.05032E+00	1.05093E+00	2.89569E-02	2.75695E-02	1.00003E+00	1.09994E+00
cDTubiIn	6.01683E+00	6.02825E+00	2.33352E+00	3.87832E-01	2.00892E+00	9.97835E+00
cDCarrTubi	1.05547E+01	1.04191E+01	1.86643E+00	1.76835E-01	7.50288E+00	1.39989E+01
fXAssTubi	6.95577E-03	6.96690E-03	1.72816E-03	2.48449E-01	4.00050E-03	9.99933E-03
kXUpTubi	5.56462E-04	5.58096E-04	2.57340E-04	4.62457E-01	1.00190E-04	9.99806E-04
hXUpTubi	1.05030E-01	1.05044E-01	2.89070E-03	2.75225E-02	1.00015E-01	1.09979E-01

kXExcrTubi	8.81855E+00	9.01935E+00	3.79848E+00	4.30738E-01	2.00666E+00	1.49988E+01
cXDTubiIn	1.01263E+01	1.02175E+01	2.87500E+00	2.83914E-01	5.00201E+00	1.49939E+01
fDAssCypr	6.99367E-01	6.98912E-01	5.80874E-02	8.30572E-02	6.00246E-01	7.99811E-01
kDAssCypr	4.89957E+00	4.90023E+00	5.70632E-02	1.16466E-02	4.80004E+00	4.99993E+00
kDRespCypr	1.04882E+00	1.04716E+00	1.99335E-01	1.90056E-01	7.00646E-01	1.39993E+00
kDMortCypr	5.48590E-01	5.48665E-01	2.89055E-02	5.26906E-02	5.00001E-01	5.99953E-01
hDConsCypr	2.54927E-01	2.54897E-01	2.91081E-03	1.14182E-02	2.50008E-01	2.59992E-01
cDCyprIn	6.49973E-01	6.49527E-01	2.87971E-02	4.43051E-02	6.00044E-01	6.99970E-01
cDCarrCypr	2.04836E+00	2.04851E+00	2.87776E-02	1.40491E-02	2.00001E+00	2.09993E+00
fXAssCypr	2.98686E-02	2.98985E-02	1.15289E-02	3.85988E-01	1.00150E-02	4.99662E-02
kXUpCypr	5.01107E-05	4.92688E-05	2.91181E-05	5.81075E-01	1.71241E-07	9.99944E-05
hXUpCypr	5.00997E-01	4.97324E-01	2.87242E-01	5.73342E-01	1.10895E-03	9.99956E-01
kXExcrCypr	1.10618E+01	1.11026E+01	3.44497E+00	3.11429E-01	5.01115E+00	1.69897E+01
cXDCyprIn	2.75116E-01	2.75421E-01	1.44555E-02	5.25433E-02	2.50058E-01	2.99922E-01
fDAssEel	7.00560E-01	7.00865E-01	5.79047E-02	8.26549E-02	6.00458E-01	7.99897E-01
kDAssEel	3.14922E+00	3.14827E+00	2.88125E-02	9.14908E-03	3.10004E+00	3.19989E+00
kDRespEel	8.21775E-01	8.24317E-01	6.91126E-02	8.41016E-02	7.00155E-01	9.39679E-01
kDMortEel	1.24520E+00	1.25510E+00	4.30658E-01	3.45855E-01	5.01269E-01	1.99426E+00
hDConsEel	2.54981E-01	2.55057E-01	2.85745E-03	1.12065E-02	2.50004E-01	2.59997E-01
cDEelIn	4.27466E-01	4.27488E-01	1.44761E-03	3.38649E-03	4.25004E-01	4.29980E-01
cDCarrEel	3.75030E-01	7.75236E-01	1.43235E-02	1.84812E-02	7.50054E-01	7.99875E-01
fXAssEel	7.47421E-02	3.44867E-02	8.71329E-03	2.50799E-01	2.00088E-02	4.99596E-02
kXUpEel	3.98104E-07	3.94718E-07	2.25566E-07	5.66601E-01	1.07302E-08	7.98425E-07
hXUpEel	1.04964E-01	1.04974E-01	2.94947E-03	2.80999E-02	1.00009E-01	1.09981E-01
kXExcrEel	4.55226E+00	4.56071E+00	1.40360E+00	3.08331E-01	2.00109E+00	6.99099E+00
cXDEelIn	1.09267E-01	1.08430E-01	5.13205E-02	4.69679E-01	2.03993E-02	1.99964E-01
fDAssPerch	7.00112E-01	6.99965E-01	5.77238E-02	8.24495E-02	6.00085E-01	7.99904E-01
kDAssPerch	3.75509E+00	3.78112E+00	7.19360E-01	1.91569E-01	2.50025E+00	4.99908E+00
kDRespPerch	8.01908E-01	8.03304E-01	1.14046E-01	1.42219E-01	6.00975E-01	9.99803E-01
kDMortPerch	7.45848E-01	7.44287E-01	1.45520E-01	1.95107E-01	5.00538E-01	9.99668E-01
hDConsPerch	7.75256E-01	7.75950E-01	1.45579E-02	1.87781E-02	7.50087E-01	7.99913E-01
cDPerchIn	4.62972E-01	4.63241E-01	2.18924E-02	4.72866E-02	4.25076E-01	4.99874E-01
cDCarrPerch	7.75005E-01	7.74407E-01	1.46303E-02	1.88776E-02	7.50008E-01	7.99900E-01
fXAssPerch	7.04418E-02	7.06481E-02	1.72569E-02	2.44981E-01	4.00231E-02	9.99590E-02
kXUpPerch	4.91893E-04	4.90089E-04	2.84530E-04	5.78438E-01	2.10132E-06	9.98112E-04
hXUpPerch	1.04884E+00	1.04859E+00	2.89435E-02	2.75956E-02	1.00000E+00	1.09997E+00
kXExcrPerch	7.49995E+00	7.51271E+00	1.45155E+00	1.93541E-01	5.00677E+00	9.99822E+00
cXDPerchIn	4.04916E+00	4.04856E+00	2.88780E-02	7.13185E-03	4.00023E+00	4.09997E+00
fDAssDuck	6.97626E-01	6.94229E-01	5.74340E-02	8.23279E-02	6.00013E-01	7.99301E-01
kDAssDuck	3.50250E+01	3.50709E+01	2.86618E+00	8.18322E-02	3.00139E+01	3.99999E+01
kDRespDuck	2.04982E+01	2.04932E+01	8.71821E-01	4.25316E-02	1.90003E+01	2.19974E+01
kDMortDuck	2.97552E+00	2.98066E+00	1.14859E+00	3.86013E-01	1.00172E+00	4.98797E+00
hDConsDuck	5.49369E-01	5.47668E-01	2.87803E-02	5.23879E-02	5.00008E-01	5.99843E-01
cDDuckIn	1.50547E-02	1.51168E-02	2.84728E-03	1.89129E-01	1.00039E-02	1.99972E-02
cDCarrDuck	2.75103E-02	2.75523E-02	1.43681E-03	5.22280E-02	2.50020E-02	2.99999E-02
fXAssDuck	5.33860E-02	5.34543E-02	2.74084E-02	5.13401E-01	5.03607E-03	9.99719E-02
kXExcrDuck	3.04094E+00	3.07957E+00	1.14485E+00	3.76480E-01	1.00078E+00	4.99856E+00
cXDuckIn	1.05023E+00	1.05133E+00	2.89874E-02	2.76011E-02	1.00004E+00	1.09975E+00
fDAssCorm	6.99557E-01	6.99865E-01	5.82529E-02	8.32711E-02	6.00179E-01	7.99934E-01
kDAssCorm	3.99707E+01	4.00874E+01	4.37904E+00	1.09556E-01	3.20171E+01	4.75698E+01
kDRespCorm	1.40025E+01	1.39876E+01	1.13641E+00	8.11576E-02	1.20052E+01	1.59975E+01
kDMortCorm	2.73951E+00	2.73665E+00	1.00813E+00	3.67997E-01	1.00159E+00	4.49948E+00
hDConsCorm	1.27468E+00	1.27433E+00	1.44094E-02	1.13043E-02	1.25002E+00	1.29999E+00
cDCormIn	6.01905E-03	6.01339E-03	5.69937E-04	9.46888E-02	5.00089E-03	6.99895E-03
cDCarrCorm	1.27411E-02	1.27365E-02	1.43721E-04	1.12800E-02	1.25011E-02	1.29999E-02
fXAssCorm	7.98010E-02	7.93434E-02	4.04060E-02	5.06335E-01	1.00145E-02	1.49837E-01
kXExcrCorm	3.03651E+00	3.05564E+00	1.15286E+00	3.79665E-01	1.00734E+00	4.99870E+00
cXDCormIn	1.05101E+00	1.04984E+00	2.84167E-02	2.70376E-02	1.00002E+00	1.09993E+00
cBAFLiverPer	3.50133E+00	3.49411E+00	8.76367E-01	2.50296E-01	2.00389E+00	4.99438E+00
cBAFLiverDuc	3.48991E+00	3.45549E+00	8.79351E-01	2.51969E-01	2.00651E+00	4.99729E+00
cBAFLiverCor	3.44962E+00	3.43776E+00	8.62276E-01	2.49962E-01	2.00366E+00	4.99694E+00

Parameters voor lindaan, die afwijken van bovenstaande lijst wat betreft ecotoxicologie

```

!----- cmd file for sedom.csl -----
! Last changes 25 january 1994

!----- Compound properties -----
s cXLogKow = 3.85
! from cXLogKow we estimate Koc, which is the linear partition coeff.
! according to EPA (1985) this is alright, as long as conc. is less
! than half the equilibrium concentration. For lindane this is
! 5-12 ppm at 25 degr Celsius, so conc. should be below 2.5-6 ug/l.
s cXTransAir = 2.63D5 ! given 3000 cm/hr
s cXTransWater = 1753.25 ! given 20cm/hr
s cXHenry = 2.7D-4 ! from PARAMS database [-]
s cXWetDep = 6.0D-5 ! Slooff et al. 1988 [g.m-2.y-1]
s cXDryDep = 3.0D-5 ! Estimated to be 0.5* WetDep, not confirmed!
s cXSedTotIn = 0.05 ! should match axsedtotout=0.05 - 0.9 ug/kgDW
!----- settings for water phase and sedimentation behaviour -----
s cXDissTotIn = 0.1 ! contemporary value. High historic value = 0.1 (ug/l)
s cXDegrDiss = 5.0D0 ! equal in water and sediment [y-1]
!-----Settings for Phyt accumulation ----No metabolisation present!
s kXUpPhyt2 = 0.0D0 ! Disable biphasic uptake of Cd
s kXUpPhyt1 = 0.2D0 ! calibration on PARAMS and ACQUIRE
s hXUpPhyt1 = 5.0D0 ! high value
!----- Settings for Zoo accumulation -----
s cXDZooIn = 0.03 ! ug/kgDW, guess
    
```

```

s fXUpZoo      = 0.05      ! Ass. eff. over gill, must be low to calibrate
s fXAssZoo     = 0.9D0     ! Ass. Eff. over gut, usually quite high
s kXMetaZoo    = 320      ! initial guess          Calibrate on Hendriks & Pieters
!----- Settings for Dreiss accumulation -----
! if filtering rates are OK, then a very low excretion is required to
! get BCF's as high as reported in AQUIRE, or hardly any metabolisation.
s kXMetaDreiss = 15       ! calibrate on high BCF from AQUIRE database
s fXAssDreiss  = 0.9D0! Ass. Eff. over gut, usually quite high
s fXUpDreiss   = 0.05     ! must be higher than metal, but how high unknown
! ----- Settings for Chiro accumulation -----
! if consumption rates are OK, then a high excretion/meta is needed for
! calibration on low BCF's from radiotracer exp. (traas\mcd\chiro.mcd)
s fXAssChiro   = 0.9D0   ! usually high
s kXUpChiro    = 2.2D-2  ! from PARAMS database, calculated & fitted
s hXUpChiro    = 1.0     ! to get almost linear uptake at low conc.
s kXMetaChiro  = 240     ! calibrate
! ----- Settings for Tubi accumulation -----
s fXAssTubi    = 0.9D0
s kXUpTubi     = 2.2D-2  ! like Chiro
s hXUpTubi     = 1.0     ! to get almost linear uptake at low conc.
s kXExcrTubi   = 240     ! like Chiro
! The same story holds for Tubi, if combined with Chiro: a low hxuptubi
! gives higher sediment conc. (increasing), and high hxup (1.0) gives
! lower bioacc
! ----- Settings for CYPR accumulation -----
s fXAssCypr    = 0.9D0 !
s kXMetaCypr   = 25     ! taken from PARAMS database for Trout
! ----- Settings for PERCH accumulation -----
s fXAssPerch   = 0.9D0 !
s kXMetaPerch  = 25     ! taken from PARAMS database for Trout
! ----- Settings for Eel accumulation -----
s fXAssEel     = 0.9D0 ! from De Boer & Pieters, 1991
s kXMetaEel    = 25     ! taken from PARAMS database for Trout
! ----- Settings for Duck accumulation -----
s kXExcrDuck   = 20     ! range from 18-24 y-1, PARAMS database
s fXAssDuck    = 0.9D0 ! usually high for Chlorinated compounds
! ----- Settings for Corm accumulation -----
s fXAssCorm    = 0.9D0
s kXEMetaCorm  = 20     ! analogous to Duck

```

C3 Parameter-referenties

Gegevens gebruikt voor het vaststellen van de parameterranges zijn opgeslagen in de PARAMS database in het pakket CARDBOX. Hieronder volgen de verwijzingen naar de literatuur.

cBAFLiverCorm	analogous to CATS-1 (Traas & Aldenberg 1992)
cBAFLiverDuck	De Kock & Bowmer (1993)
cClHdHv	WAKWAL database (RIZA)
cDCarrChiro	AquaSense (1993)
cDCarrCorm	Van Hemelrijk (1993)
cDCarrCypr	Van Hemelrijk (1993)
cDCarrDreiss	Table 4.14 Vanhemelrijk (1993)
cDCarrEel	van Hemelrijk, 1993
cDCarrPerch	van Hemelrijk (1993)
cDCarrPhyt	Calculated from WATNAT (De Nijs et al. 1991)
cDCarrTubi	AquaSense (1993)
cDCarrZoo	RIZA (1991)
cDChiroIn	Table 4.13, Vanhemelrijk (1993)
cDCormIn	Table 4.16 Vanhemelrijk (1993)
cDDreissIn	Pers. Comm. Dr M.H.S. Kraak
cDDuckIn	table 4.16 Vanhemelrijk (1993)
cDEelIn	Table 4.7, Vanhemelrijk (1993)
cDEelIn	Van Hemelrijk (1993)
cDPerchIn	Van Hemelrijk (1993)
cDPhytIn	WL (1992)
cDSedIMIn	Calculated from MIVEOS database
cDSedOMIn	Calculated from MIVEOS database
cDSetSusIM	CUWVO (1987)
cDepthSed	n.a.
cDFiltMaxDreiss	Kraak et al. 1991
cDFiltZoo	Bodar et al. (1988)
cDSetSusOM	CUWVO (1987)
cDSetSusSM	
cDSusIMIn	De Nijs et al. (1993)
cDSusOMIn	De Nijs et al. (1993) De Nijs & Burns (1990)
cDSusSMIn	
cDTubiIn	Table 4.13 Vanhemelrijk (1993)
cDWeightPerch	van der Valk et al. 1989 idem
cDWeightPerch	van der Valk et al. 1989 idem
cDZooIn	RIZA (1991)
cInFlow	Berekend met WATNAT, De Nijs et al. (1993))
cO2HdHv	De Nijs & Burns 1990
cOutFlow	Berekend met WATNAT, De Nijs et al. (1993).
cPHdHv	De Nijs & Burns (1990)
cRhoSedIM	Jorgensen et al. 1991
cRhoSedOM	Jorgensen et al. 1991
cRhoSedSM	Jorgensen et al. 1991
cTempHdHv	De Nijs & Burns, 1990
cTortSed	taken from WATNAT, De Nijs et al. (1993)
cVolume	WATNAT, De Nijs et al. (1993).
fDAssChiro	Jorgensen et al. (1991)
fDAssCypr	Jorgensen et al. (1991)
fDAssDreiss	Jorgensen et al. (1991)
fDAssEel	Jorgensen et al. (1991)
fDAssPerch	Jorgensen et al. (1991)
fDAssTubi	Jorgensen et al. (1991)
fDAssZoo	All values: Bodar et al. (1988) (zie boven)
fDAutoPhyt	Janse & Aldenberg (1990), WL (1992)
fDEnvPhyt	
fDFatDreiss	Chevreuil & Testard (1991)
fDFatEel	Tabel 2.2., Vanhemelrijk (1993)
hDConsChiro	estimate
hDConsCorm	calibration
hDConsCypr	estimate
hDConsDuck	estimate
hDConsEel	estimate
hDConsPerch	estimate
hDConsTubi	calibrate on field biomass
hDFiltZoo	Janse et al. (1992)
kDAssChiro	Peters (1983)
kDAssCorm	van Hemelrijk (1993), Peters (1983)
kDAssCypr	Peters (1983)
kDAssDuck	Peters (1983)
kDAssEel	Peters (1983)
kDAssPerch	Peters (1983)

kDAssTubi	Peters(1983)
kDConsZoo	Bodar et al. (1988)
kDGrPhyt	Wong & Chang (1992)
kDMinSedOM	
kDMinSusOM	WL (1992), Janse & Aldenberg (1990)
kDMortChiro	estimate
kDMortCorm	estimate
kDMortCypr	estimate
kDMortDreiss	estimate
kDMortDuck	estimate
kDMortEel	estimate
kDMortPerch	estimate
kDMortPhyt	WL (1992)
kDMortTubi	estimate
kDMortZoo	Janse & Aldenberg (1990)
kDRespChiro	Peters (1983)
kDRespCorm	Peters (1983)
kDRespCypr	Peters (1983)
kDRespDreiss	Quigley et al. 1993
kDRespDuck	Peters (1983)
kDRespEel	Peters (1983)
kDRespPerch	Peters (1983)
kDRespPhyt	from WATNAT, De Nijs et al. (1992)
kDRespTubi	Peters (1983)
kDRespZoo	Peters (1983)
cadmium parameters	
cXDChiroIn	WL (1992)
cXDDreissIn	Dorgelo & van der Kamp (1992), WL (1992)
cXDEelIn	Romijn et al. (1991a)
cXDEelIn	Dorgelo & van der Kamp (1992)
cXDiffSed	De Nijs & Burns (1990) Vanderborght and Wollast(1977), cited in De Nijs & Burns (1990)
cXDissTotIn	Revis et al. 1989
cXDPerchIn	WL (1992)
cXDryDep	
cXDTubiIn	Dorgelo & van der Kamp (1992)
cXDZooIn	Dorgelo & van der Kamp (1992)
cXSedTotIn	MIVEOS database
cXWetDep	CCRX (1985)
fxAssChiro	calibrated on BCF values
fxAssCorm	Jorgensen et al. (1991)
fxAssCypr	Harrison & Klaverkamp (1989), Douben (1989)
fxAssDreiss	calibrate on BCF values
fxAssDuck	Jorgensen et al. (1991), calibration
fxAssEel	Giles (1988), Douben (1989)
fxAssPerch	Giles (1988), Douben (1989)
fxAssTubi	estimate
fxAssZoo	WL (1992)
fxUpDreiss	calibrate on BCF values
fxUpZoo	calibrate on BCF values
hXUpAlgae	Hart et al. (1979)
hXUpChiro	estimate
hXUpCypr	calibrate on BCF values
hXUpPerch	calibrated on Iivonen et al. (1992)
hXUpPhyt1	Mang & Tromballa (1978)
hXUpPhyt2	Mang & Tromballa (1978)
hXUpTubi	calibrate on BCF values
kXExcrChiro	Seidman et al. (1986)
kXExcrChiro	calibrate on BCF values
kXExcrCorm	Jorgensen et al. (1991)
kXExcrCypr	Harrison & Klaverkamp (1989), Wicklund & Run(1988)
kXExcrDreiss	estimate
kXExcrEel	Harrison & Curtis (1992), Wicklund & Run (1988)
kXExcrPerch	Harrison & Klaverkamp (1992), Harrison & Curtis (1992), calibration
kXExcrTubi	estimate
kXExcrZoo	calibrate on BCF values
kXLeachDisSed	??
kXSorpDet	
kXUpChiro	calibrated on Seidman et al. (1986)
kXUpCypr	calibrate on BCF values
kXUpPerch	calibrated on Iivonen et al. (1992)
kXUpPhyt1	Mang & Tromballa (1978)
kXUpPhyt2	Mang & Tromballa (1978)
kXUpTubi	calibrate on BCF values
lindaan parameters	
cXBCFAlgae	taken from Janssen et al. 1987
cXBCFAlgae	taken from Janssen et al. 1987
cXBCFAsellus	Thybaud & Le Bras (1988)

cXBCFChiro	Fisher (1985)
cXBCFCypr	Cossarini-Dunier et al. (1987)
cXBCFDreiss	Chevreuril & Testard (1991)
cXBCFDuck	Kan, various, cited in Janssen et al. 1987
cXBCFDuck	Kan, various, cited in Janssen et al. 1987
cXBCFFish (1993)	Saguira et al. (1979), cited by Janssen et al. 1987 and Leon et al. (1993)
cXBCFFish	Saguira et al. (1979), cited by Janssen et al. 1987 and Leon et al. (1993)
cXBCFFish	Marcelle & Thome (1983)
cXBCFFish	Kanazawa (1981)
cXBCFFish	Thybaud (1990)
cXBCFPhyt	Thybaud (1990)
cXBCFPhyt	Mailhot (1987)
cXBCFZoo	Thybaud (1990)
cXDEelIn	Van der Valk et al. 1989
cXDEelIn	Van der Valk et al. 1989
cXDryDep	Slooff et al. 1987
cXHenry	Slooff & Matthijsen 1987; De Nijs & Burns 1990, Slooff et al. 1988
cXKow	Slooff & Matthijsen (1987)
cXMolWeight	De Nijs & Burns 1990
cXMolWeight	ASTER, EPA database
cXMTRBird	Romijn et al. (1991a)
cXMTRMammal	Romijn et al. (1991A)
cXNOECBird	Romijn et al. (1991a)
cXNOECBird	Romijn et al. 1991a
cXNOECBird	Romijn et al. 1991a
cXNoecDuck	Janssen et al. 1987
cXNoecDuck	Janssen et al. 1987
cXNOECFish	Slooff (1979)
cXNOECMammal	Romijn et al. (1991a)
cXNoecMammals	Romijn et al. 1991a
cXNoecMammals	Romijn et al. 1991a
cXNoecRodent	Janssen et al. 1987
cXTransAir	
cXTransWater	
cXWetDep	Slooff & Mathijssen. 1987
kXDegrDiss	Caquet et al. (1992)
kXDegrDissSed	Peijnenburg, mond. med.
kXDegrSed	Sloof & Matthijsen (1987)
kXDegrSed	Caquet et al. (1992)
kXExcrDuck	Kan, various, cited in Janssen et al. 1987
kXExcrDuck	Kan, various, cited in Janssen et al. 1987
kXExcrRodent	Janssen et al. 1987
kXExcrRodent	Janssen et al. 1987
kXMetaFish	Tooby & Durbin (1975)
kXMetaFish	Tooby & Durbin (1975)
kXSorpDet	Caquet et al. (1992)
kXUpChiro	Lohner & Collins (1987)

Bijlage D: Boxplots

Een boxplot is de weergave van een verdeling van bepaalde waarden, zoals de berekende verdeling van concentraties in het sediment in CATS-2. In plaats van het weergeven van een histogram van de hele verdeling laat een boxplot enkele karakteristieke kenmerken van een verdeling zien (fig D1). Als voorbeeld is de verdeling van de berekende concentratie opgelost cadmium in het jaar 1994 afgebeeld.

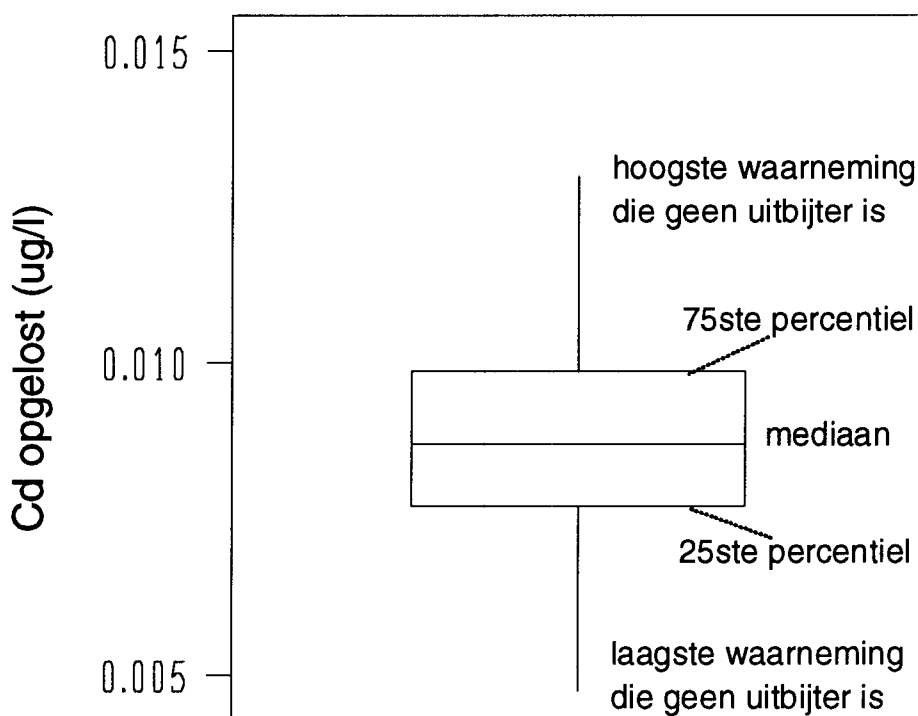


Fig D1. De onderdelen van een boxplot

De boxplot bestaat uit een doos (box) en twee staarten (whiskers). De doos bevat 50% van alle waarnemingen. Omdat dit de resultaten zijn van een Monte-Carlo analyse, kan men echter beter spreken van berekeningen in plaats van waarnemingen. De lijn in de doos is de mediaan van de verdeling. Hoe meer de mediaan uit het midden van de doos ligt, des te schever is de verdeling. Wanneer de mediaan dichterbij de 25ste percentiel ligt, is de verdeling rechtsscheef. Is de mediaan dichterbij de 75ste percentiel gelegen, dan is de verdeling linksscheef. De staarten van de verdeling bevatten de rest van de verdeling. Waarden die meer dan 1.5 standaarddeviatie afliggen van de 25 of 75ste percentiel, zijn uitbijters. Deze waarden kunnen in dezelfde figuur worden weergegeven met bijv. sterren of kruisjes. Omwille van de duidelijkheid zijn de uitbijters in de boxplots van dit rapport weggelaten.

Dankwoord

De auteurs willen de volgende personen bedanken: Ron Lammers (LWD) voor het beheren van de SUN - faciliteiten, Rick Wortelboer (LWD) en Wilbert Slooff (ECO) voor het kritisch doorlezen van het manuscript, Mindert de Vries (WL) voor discussies en gegevens in het kader van de Deltastudie, RIZA en RIWA voor gebruik van hun databases, Peter Melis (BDA) voor literatuuronderzoek en Henri den Hollander (ECO) voor inwijding in het gebruik van AQUIRE.

Literatuur

- Aldenberg, T., Slob, W. (1993). Confidence limits for hazardous concentrations based on logistically distributed NOEC toxicity data. *Ecotox. Environ. Saf.* 25: 48-63.
- Aquasense (1993). Biologische typologie zoete waterbodems. Normaalwaarden voor biologische parameters. In opdracht van het RIZA, Rapport nr. 92.0241.
- Arnold, D.E. (1971). Ingestion, assimilation, survival and reproduction by *Daphnia pulex* fed seven species of blue-green algae. *Limnol. Oceanogr.* 16: 906-920.
- ASTER (1993). Aster ecotoxicity profile. US-EPA Duluth, 29 oct 1993, from AQUIRE on-line service.
- Beurskens, J.E.M., Winkels, H.J., De Wolf, J. Dekker, C.G.C. (1994). trends of priority pollutants in the rhine during the last 50 years. *Water Sci. Technol.* (in press).
- Bodar, C.W.M., van Leeuwen, C.J., Voogt, P.A., Zandee, D.I. (1988). Effect of cadmium on the reproduction strategy of *Daphnia magna*. *Aquatic Toxicol.* 12: 301-310.
- Caquet, T., Thybaud, E., Le Bras, S., Jonot, O., Ramade, F. (1992). Fate and biological effects of lindane and deltamethrin in freshwater mesocosms. *Aquat. Toxicol.* 23: 261-278.
- CCRX (1985). Cadmium, de belasting van het nederlandse milieu. CCRX evaluatierapport, Ministerie van VROM, Leidschendam.
- Chevreuil, M. Testard, P. (1991). Emploi d'un lamellibranche filtreur (*Dreissena polymorpha* Pallas) pour l'evaluation des pollutions organochlorées (PCB, pesticides). *C.R. Acad. Sci, Paris* 312: 473-477.
- Cossarini-Dunier, M., Monod, G., Demael, A., Lepot, D. (1987). Effect of Gamma-Hexachlorocyclohexane (Lindane) on carp (*Cyprinus carpio*). II. Effect of chronic intoxication on humoral immunity in relation to tissue pollutant levels.. *Ecotoxicol. Environ. Saf.* 13: 346-351.
- CUWVO (1987). Vergelijkend onderzoek naar de eutrofiering in nederlandse meren en plassen. Resultaten van de derde eutrofierings-enquete. Coordinatiecommissie uitvoering wet verontreiniging oppervlaktewateren, werkgroep VI.
- De Kock, W. Chr., Bowmer, C.T. (1993). bioaccumulation, biologicaleffects; and food chain transfer of contaminants in the zebra mussel (*Dreissena polymorpha*). In: *Zebra mussels. Biology, impacts, and control*. Nalepa, T.F., Schloesser, D.W. (eds.). Lewis Publishers, Boca Raton.
- De Nijs, A.C.M., Burns, L.A. (1990). Risk Assessment of New Chemical Substances: Applicability of EXAMS II as an advanced Water Quality Model. RIVM report nr. 71870200.
- De Nijs, A.C.M., Janse, J.H., Wortelboer, F.G., Kramer, P.R.G., Aldenberg, T. (1993). WATNAT Model documentation.. RIVM interne notitie LWD 93-13.
- Di Toro, D.M., Mahony, J.D., Hansen, D.J., Scott, K.J., Hicks, M.B., Mayr, S.M., Redmond, M.S. (1990). Toxicity of cadmium in sediments: The role of acid volatile sulfide. *Environ. Toxicol. Chem.* 9: 1487-1502.
- Dorgelo J., van der Kamp L. (1992). Heavy metals in the IJsselmeer area (The Netherlands): supply, distribution and concentrations in water, sediment and organisms. A review. *Hydrobiol. Bull* 25: 191-210.
- Dudok van Heel, H.C., Smit, H., Wiersma, S.M. (1992). macrofauna in de diepe waterbodem van het noordelijk deltabekken. Riza notitie nr 91.051, Ecologisch herstel rijn rapp. nr 39-92, RIZA dordrecht.
- Dudok van Heel, H.C., van der Velden, J.A., Wiersma, S.M. (1993). Ontwikkeling van macrofauna in aangebrachte sedimenten in het Noordelijk Deltabekken. RIZA rapport nr. 93.022, RIZA dordrecht.
- Elbers, M.A., Traas, Th.P. (1993). BIOMAG: risico-analyse van bodemverontreiniging voor terrestrische vertebraten. CML report 93 : 71 pp.
- Ernst, W. (1977). Determination of the bioconcentration potential of marine organisms - a steady state approach. *Chemosphere* 11: 731-740.
- Ferard, J.F., Jouany, J.M., Truhaut, R., Vasseur, P. (1983). Accumulation of cadmium in a freshwater food chain experimental model. *Ecotox. Environ. Saf.* 7: 43-52.
- Fisher, S.W., Wadleigh, R.W. (1985). Effects of temperature on the acute toxicity and uptake of lindane by *Chironomus riparius* (Meigen) (Diptera: Chironomidae). *J. Economic Entomol.* 78: 1222-1226.
- Fisher, S.W. (1985). Effects of pH on the toxicity and uptake of [¹⁴C]Lindane in the midge *Chironomus riparius*. *Ecotoxicol. Environ. Saf.* 10: 202-208.
- Giles, M.A. (1988). Accumulation of cadmium by rainbow trout, *salmo gairdneri*, during extended exposure. *Can. J. fish. Aquat.* 45: 1045-1053.

- Harrison, S.E., Curtis, P.J. (1992). Comparative accumulation efficiency of 109 cadmium from natural food (*hyalella azteca*) and artificial diet by rainbow trout (*Oncorhynchus mykiss*). *Bull. Environ. Contam. Toxicol* 49: 757-764.
- Harrison, S.E., Klaverkamp, J.F. (1989). Uptake, elimination and tissue distribution of dietary and aqueous cadmium by rainbow trout and lake whitefish. *environ. Toxicol. Chem.* 8: 87-97.
- Hekstra, G.P. (1990). Naar een verdere ecologische onderbouwing van het stoffenbeleid. Project Ecologische Inpasbaarheid van menselijk handelen met Stoffen (PEIS).. *H2O* 23: 37-41.
- Hendriks, A.J.; Pieters, H. (1993). Monitoring Concentrations of Microcontaminants in Aquatic Organisms in the Rhine Delta - A Comparison with Reference Values. *Chemosphere* 26: 817-836.
- Hornberger, G.M., Spear, R.C. (1981). An approach to the preliminary analysis of environmental systems. *J. Environ. Mgmt.* 12: 7-18.
- Iivonen, P., Piepponen, S., Verta, M. (1992). Factors affecting trace-metal bioaccumulation in Finnish headwater lakes. *Environ. Pollut.* 78: 87-95.
- Janse J.H., Aldenberg T. (1990). PCLoos; a eutrophication model of the Loosdrecht Lakes.. RIVM report nr 714502001, RIVM Bilthoven.
- Janse, J.H.; Aldenberg, T.; Kramer, P.R.G. (1992). A mathematical model of the phosphorous cycle in Lake Loosdrecht and simulation of additional measures. *Hydrobiologia* 233: 119-136.
- Janssen et al. (1987). Bijlage bij ontwerp basisdocument hexachloorcyclohexanen. RIVM report nr. 758473004, Bilthoven, The Netherlands.
- Janssen, P.H.M., Slob, W., Rotmans, J. (1990). Gevoeligheidsanalyse en onzekerheidsanalyse: een inventarisatie van ideeën, methoden en technieken.. RIVM rapport nr. 958805001, RIVM Bilthoven.
- Janssen, P.H.M., Heuberger, P.S.C., Sanders, R. (1992). UNCSAM 1.1: a software package for sensitivity and uncertainty analysis. Manual.. RIVM Report 959101004, RIVM Bilthoven.
- Jongbloed, R.H., Mensink, B.J.W.G., Pijnenburg, J., Traas, Th.P., Luttk, R. (1994). A model for environmental risk-assessment and standard setting based on biomagnification. Top predators in terrestrial ecosystems.. RIVM report nr. 7191020XX (in press).
- Jorgensen (ed.) (1991). Handbook of environmental data and ecotoxicological parameters. International society for ecological modelling (2nd edition).
- Kanazawa, J. (1981 A). Measurement of the Bioconcentration Factors of Pesticides by Freshwater Fish and Their Correlation with Physicochemical Properties or Acute Toxicities. *Pestic. Sci.* 12(4):417-424.
- Kay, S.H. (1985). cadmium in aquatic food webs. *Residue Reviews* 96: 13-43.
- Kerkhofs, M.J.J., Smit, H. (1991). Natuurontwikkelingen Volkerak-Zoommeer in 1990. RIZA nota nr. 91.088, RIZA dordrecht.
- Kraak, M.H.S.; Lavy, D.; Peeters, W.H.M.; Davids, C. (1992). Chronic Ecotoxicity of Copper and Cadmium to the Zebra Mussel *Dreissena polymorpha*. *Arch Environ Contam Toxicol* 23: 363-369.
- Kramer, P.R.G., Traas, Th.P., Aldenberg, T., de Vries, M.B. (1994). Modelling foodweb accumulation of toxicants in sedimentation areas of the Rhine delta. *Water Sci. Technol* (as part of congress proceedings, accepted).
- Leon C. (1993). Kwaliteit van en herstelparameters voor chemisch belaste ecosystemen. IBN-DLO rapport 010, IBN Wageningen.
- Lohner, T.W., Collins, W.J. (1987). determination of uptake rate constants for six organochlorines in midge larvae. *Environ. Toxicol. Chem* 6: 137-146.
- Ma, W.C.; Denneman, W.; Faber, J. (1991). Hazardous Exposure of Ground-Living Small Mammals to Cadmium and Lead in Contaminated Terrestrial Ecosystems. *Arch Environ Contam Toxicol* 20: 266-270.
- Mailhot, H. (1987). Prediction of algal bioaccumulation and uptake rate of nine organic compounds by ten physicochemical properties. *Environ. Sci. Technol.* 21: 1009-1013.
- Mang, S., Tromballa, H.W. (1978). Aufnahme von Cadmium durch *Chlorella fusca*. *Z. Pflanzenphysiol.* 90: 293-302.
- Mang, S., Tromballa, H.W. (1978). Aufnahme von Cadmium durch *Chlorella fusca*. *Z. Pflanzenphysiol.* 90: 293-302.
- Marcelle, C., Thome, J.P. (1983). Acute toxicity and bioaccumulation of lindane in Gudgeon, *Gobio gobio* (L.). *Bull. Environ. Contam. Toxicol.* 31: 453-458.
- Peters, R.H. (1983). The ecological implications of body size. Cambridge studies in ecology. Cambridge University Press.

- Quigley, M.A., Gardner, W.S., Gordon, W.M. (1993). Metabolism of the zebra mussel (*Dreissena polymorpha*) in Lake St. Clair of the Great Lakes. In: Zebra mussels. Biology, impacts, and control. Nalepa, T.F., Schloesser, D.W. (eds.). Lewis Publishers, Boca Raton.
- Romijn, C.A.F.M., Luttik, R., Van de Meent, D., Slooff W., Canton, J.H. (1991). Presentation and analysis of a general algorithm for risk-assessment on secondary poisoning.. RIVM report nr. 679102002, RIVM Bilthoven.
- Romijn, C.A.F.M., Luttik, R., Sloof, W., Canton, J.H. (1991). Presentation of a general algorithm for effect-assessment on secondary poisoning. II: terrestrial foodchains. RIVM report nr. 679102007, RIVM Bilthoven.
- Seidman, L.A., G.Bergtrom, D.J.Gingrich, and C.C.Remsen (1986). Accumulation of Cadmium by the Fourth Instar Larva of the Fly *Chironomus thummi*. *Tissue Cell* 18(3):395-405
- Slooff, W. (1979). Detection limits of a biological monitoring system based on fish respiration. *Bull. Environ. Contam. Toxicol.* 23:517-523.
- Slooff, W., Matthijsen, A.J.C.M. (1987). Ontwerp basisdocument hexachloorcyclohexanen. RIVM report nr. 758473004, Bilthoven, The Netherlands.
- Stortelder P.B.M., van der Gaag M.A., van der Kooij L.A. (1989). Kansen voor waterorganismen.. DBW/RIZA Lelystad. Ministerie van verkeer en waterstaat, rijkswaterstaat.
- Tas, J.W. (1993). fate and effects of triorganotins in the aqueous environment. Academisch proefschrift Rijksuniversiteit Utrecht.
- Thybaud, E. (1990). Ecotoxicologie du lindane et de la deltamethrine en milieu aquatique. *Rev. sciences de l'eau* 3: 195-209.
- Thybaud, E., Le Bras, S. (1988). Absorption and elimination of lindane by *Asellus aquaticus* (crustacea, Isopoda). *Bull. Environ. Contam. Toxicol* 40: 731-735.
- Timmermans, K.R. (1991). Trace metal ecotoxicokinetics of chironomids. Academisch Proefschrift Universiteit van Amsterdam
- Traas, Th.P., Aldenberg, T. (1992). CATS-1: a model for predicting contaminant accumulation in meadows. The case of cadmium. RIVM report nr. 719103001, RIVM Bilthoven, The Netherlands.
- Traas, Th.P., Aldenberg, T. (1994). Uncertainty analysis and risk assessment combined: Application to a bioaccumulation model. Proceedings of Congress 'Predictability and nonlinear modeling in natural sciences and economics', Wageningen The Netherlands (in press).
- Traas, Th.P., Kramer, P.R.G., Wortelboer, F.G. (1993). TREATSAM: Interface tussen UNCSAM en ACSL-model. LWD-notitie 93-7.
- U.S. Environmental Protection Agency (1980). Ambient Water Quality Criteria for Hexachlorocyclohexane EPA-440/5-80-054, Criteria and Standards Division,. Office of Water Regulations and Standards, Washington, D.C.
- US-EPA (1985). Water Quality Assessment: A screening procedure for toxic and conventional pollutants in surface and ground water - Part1 (Revised 1985). United States EPA, report nr. 600/6-85/002a, Athens.
- van Dam, E. (1992). De achtergrond van de grens- en streefwaarden uit de notitie Milieukwaliteitsdoelstellingen bodem en water. intern document ministerie van VROM, Directie SVS, Den Haag.
- Van de Meent D., Aldenberg T., Canton J.H., van Gestel C.A.M., Slooff W. (1990). Desire for levels. Background study for the policy document "Setting Environmental Quality Standards for Water and Soil". RIVM report nr. 670101002, RIVM Bilthoven.
- Van der Valk F., Pieters, H., Wegman, R.C.C. (1989). Bioaccumulation in yellow eel (*Anguilla anguilla*) and perch (*Perca fluviatilis*) from the Dutch branches of the Rhine - mercury, organochlorine compounds and polycyclic aromatic hydrocarbons. RIVO rapport nr MO 89-205, Ecologisch herstel Rijn nr 7-1989.
- Van Dijk, G.M., Martejn, E.C.L. (eds) (1993). Ecological rehabilitation of the River Rhine, the Netherlands research summary report (1988-1992). Report of the project 'Ecological rehabilitation of the rivers Rhine and Meuse'. EHR report no. 50.
- Van Straalen, N.M. (1994). Strategisch onderzoek systeemoecologie en -toxicologie. Conclusies en samenvattingen van het peis-beleids-symposium. Ministerie van VROM, Directie SVS, Den Haag.
- Van Straalen N.M., Denneman C.A.J. (1989). Ecotoxicological evaluation of soil quality criteria.. *Ecotox. Environ. Saf.* 18: 241-251.

- Vanhemelrijk, J., Peters, J., Butijn, G., Vermij, S., Lammens, E., Laane, W., Wortel, A. (1993). Amoebes Ijsselmeergebied. Studies naar ecologische ontwikkelingsrichtingen voor het Ijsselmeergebied.. Watersysteemverkenningen. RIZA nota 93.014, RIZA Lelystad : 250 pp
- Venema, R. (1991). kwaliteit zwevend stof 1988-1990. RIZA nota nr. 91.040, RIZA Lelystad.
- Wicklund, A., Runn, P., Norrgren, L. (1988). cadmium and zinc interactions in fish: effects of zinc on the uptake, organ distribution and elimination of ¹⁰⁹Cd in the zebrafish, *Brachydanio rerio*. Arch. Environ. Contam. Toxicol. 17: 345-354.
- VROM (1991). Notitie milieukwaliteitsdoelstellingen bodem en water. Tweede kamer stuk nr. 21990 (nr 1), vergaderjaar 1990-1991. SDU uitgeverij, 's-Gravenhage.
- VROM (1993). Stoffen & Normen 1993-1994. Samsom Tjeenk Willink, Alphen aan de Rijn.
- WL (1992). Exotoxicologische studie t.b.v. MER baggerspeciedepot Hollandsch Diep. WL rapport T0986.00/2.00.