

Bilaga 3

Modellbeskrivning - matematisk beskrivning av beräkningsprogram

I denna bilaga ges matematiska beskrivningar av beräkningarna i riktvärdesmodellen. I bilagan refereras till historiken för de ekvationer som används i beräkningsprogrammet. Följande kodbeteckningar används:

- Historik A** I enlighet med NV rapport 4639 (Naturvårdsverket, 1997b).
Historik B I enlighet med NV rapport 4889 (Naturvårdsverket och SPI, 1998).
Historik C Modifierad i jämförelse med originaldokumentet.
Historik D Har införts vid revidering av beräkningsprogrammet (2005-2008).
Historik E Har införts eller reviderats år 2016.

Ovanstående referenser för ekvationer anges på följande sätt: **Historik A**
Denna referens gäller för alla ekvationer fram till dess att en ny referens ges.

Observera att de logiska villkor som förekommer i texten endast i ett fåtal fall finns redovisade i huvudrapporten. Många av de logiska villkoren som presenteras nedan är ett resultat av önskemål om hur programmet ska fungera. Exempelvis ska programmet kunna hantera alla kombinationer av förekomst av toxikologiska data i ämnesdatabasen, vilket leder till en stor mängd logiska villkor. I programmet förekommer ytterligare ett antal logiska villkor som inte redovisas i texten nedan, främst för att presentera data på ett tydligt sätt för användaren.

Övriga markeringar som används i texten:

Kommentarer markeras med ram.

I den matematiska beskrivningen tilldelas en variabel i vissa fall en kod, enligt följande:

Kod	Redovisad text i beräkningsprogrammet	Förklaring
-88	data saknas	Nödvändiga data saknas för att kunna beräkna ett resultat för den aktuella variabeln.
-99	beaktas ej	Beroende på de platsspecifika val som gjorts, eller det ämne som avses, är denna variabel ointressant. <i>Exempel 1:</i> Envägskoncentration för intag av grönsaker när denna exponeringsväg valts bort. <i>Exempel 2:</i> Envägskoncentration för inandning av ånga för zink.

Dessa koder används även i beräkningsprogrammet i Excel men översätts till text som presenteras för användaren.

Fördelningsmodell 1: Till porvatten

Historik A

Om oorganiskt ämne:

Felmeddelande för oorganiska ämnen om K_d saknas.

Om organiskt ämne:

Om K_d saknas: $K_d = K_{oc} \cdot f_{oc}$

Om K_{oc} saknas: $K_{oc} = 0.411 \cdot K_{ow}$

Om K_d finns: K_d i ämnesdatabasen används.

Historik A, C

Beräkning av föroreningens fördelning mellan löst i porvatten och jord:

$$CF_{water} = \left[K_d + \frac{(\theta_w (1 + K_{DOC} DOC) + \theta_a H)}{\rho_b} \right]^{-1}$$

Beräkning av halt rörlig förorening i vatten i förhållande till halt löst i vattnet:

$$CF_{water_mob} = 1 + K_{DOC} DOC$$

K_{DOC} kan ges som en ämnesspecifik parameter, men om inget värde ges beräknas den för organiska föroreningar som:

$$K_{DOC} = f_{doc} K_{oc}$$

Observera att enligt ovan så kommer K_d -värden som finns för organiska ämnen i ämnesdatabasen att användas i första hand. Beräkningen av K_d -värde fyller alltså endast en uppgift om K_d -värde saknas i ämnesdatabasen.

Om K_d finns men önskas ändras kan ett nytt ämne skapas och ett annat K_d -värde anges.

Fördelningsmodell 2: Till porluft

Historik A

Beräkning av föroreningsens fördelning mellan porluft och jord:

$$CF_{air} = H \cdot CF_{water}$$

Transportmodell 1: Till inomhusluft

Historik B, C

Om H finns:

Om inbyggd transportmodell har valts (standardvärde):

$$\varepsilon = \theta_w + \theta_a$$

Diffusiviteten i gasfas beräknas enligt:

$$D_{gas} = D_{0,g} \frac{\theta_a^{\left(\frac{10}{3}\right)}}{\varepsilon^2}$$

Diffusiviteten i vattenfas beräknas enligt:

$$D_{water} = D_{0,w} \frac{\theta_w^{\left(\frac{10}{3}\right)}}{\varepsilon^2}$$

Den totala ”effektiva” diffusiviteten beräknas enligt:

$$D_e = D_{gas} + \frac{D_{water}}{H}$$

Historik E

Justeringsfaktor F_{korr} för flyktiga ämnen:

$$k_{vap} = \frac{V \cdot l_{house} \cdot 365 \cdot H \cdot DF_{ia}}{\left[K_d + \frac{\theta_w(1 + K_{DOC} \cdot DOC) + \theta_a \cdot H}{\rho_b} \right] \cdot Z_{thick} \cdot \rho_b \cdot A}$$

$$F_{korr} = \frac{1 - e^{-k_{vap} \cdot T_{int,H}}}{k_{vap} \cdot T_{int,H}}$$

Utspänningsfaktor inomhus beräknas enligt:

$$DF_{ia} = \frac{L_a}{V_{house} \cdot l_{house}} \cdot \frac{A_{house} \cdot D_e}{L_a \cdot Z + A_{house} \cdot D_e} \cdot F_{korr}$$

Om H saknas:

$$DF_{ia} = -88$$

Om egen utspänningsfaktor har valts:

$$DF_{ia} = \frac{1}{IDF_{ia_user}}$$

Observera att DF_{ia} är ämnesberoende (alltså inte enbart scenariospecifik). Detta innebär att om en egen utspänningsfaktor anges så kommer inte ämnets egenskaper att beaktas, utan alla ämnen får samma utspänningsfaktor.

Transportmodell 2: Till utomhusluft

Historik D

Om inbyggd transportmodell har valts (standardvärde):

$$DF_{oa} = \frac{C_{oa}}{C_a} = \frac{1}{0,08 \cdot v \cdot \left(\frac{Z}{D_e} + \frac{1}{k_v} \right)}$$

Om egen utspänningsfaktor har valts:

$$DF_{oa} = \frac{1}{IDF_{oa_user}}$$

Observera att DF_{oa} är oberoende av ämne, till skillnad från DF_{tot-ia} .

Transportmodell 3: Till grundvatten

Beräkning av utspänningsfaktor från porvatten till grundvatten vid brunn (valfritt avstånd)

Historik A, C

Om inbyggd transportmodell har valts (standardvärde):

$$d_{mix_well} = \sqrt{0.0112 \cdot (L + X_{well})^2} + d_{aq} \cdot \left[1 - \exp\left(-\frac{(L + X_{well}) \cdot I_r}{K \cdot i \cdot d_{aq}} \right) \right]$$

Om $d_{mix_well} > d_{aq}$: $d_{mix_well} = d_{aq}$

$$y_{mix_well} = \sqrt{0.0112 \cdot (L + X_{well})^2}$$

Om förorening ovanför grundvattenytan:

$$DF_{gw_well} = \frac{L \cdot I_r \cdot W}{K \cdot i \cdot d_{mix_well} \cdot (2 \cdot y_{mix_well} + W) + (W + y_{mix_well}) \cdot (L + X_{well}) \cdot I_r}$$

Om förorening under grundvattenytan:

$$DF_{gw_well} = \frac{W \cdot Z_f}{(2 \cdot y_{mix_well} + W) \cdot d_{mix_well}}$$

Om egen utspädningsfaktor har valts:

$$DF_{gw_well} = \frac{1}{IDF_{gw_well_user}}$$

Beräkning av utspädningsfaktor från porvatten till skyddsvärt grundvatten (valfritt avstånd):

Om inbyggd transportmodell har valts (standardvärde):

$$d_{mix_protect} = \sqrt{0.0112 \cdot (L + X_{protect})^2} + d_{aq} \cdot \left[1 - \exp\left(-\frac{(L + X_{protect}) \cdot I_r}{K \cdot i \cdot d_{aq}}\right) \right]$$

Om $d_{mix_protect} > d_{aq}$:

$$d_{mix_protect} = d_{aq}$$

$$y_{mix_protect} = \sqrt{0.0112 \cdot (L + X_{protect})^2}$$

Om förorening ovanför grundvattenytan (standardvärde):

$$DF_{gw_protect} = \frac{L \cdot I_r \cdot W}{K \cdot i \cdot d_{mix_protect} \cdot (2 \cdot y_{mix_protect} + W) + (W + y_{mix_protect}) \cdot (L + X_{protect}) \cdot I_r}$$

Om förorening under grundvattenytan:

$$DF_{gw_protect} = \frac{W \cdot Z_f}{(2 \cdot y_{mix_protect} + W) \cdot d_{mix_protect}}$$

Om egen utspädningsfaktor har valts:

$$DF_{gw_protect} = \frac{1}{IDF_{gw_protect_user}}$$

Transportmodell 4: Till ytvatten

Historik A, C

Om inbyggd transportmodell har valts (standardvärde):

Om rinnande vattendrag valts: Q_{sw} anges som indata.

Om sjö valts:
$$Q_{sw} = \frac{V_{lake}}{3600 \cdot 24 \cdot 365 \cdot t_{lake}}$$

Om förorening ovanför grundvattenytan: $Q_{gw_out} = L \cdot I_r \cdot W$

Om förorening under grundvattenytan: $Q_{gw_out} = K \cdot i \cdot W \cdot Z_f$

$$DF_{sw} = \frac{Q_{gw_out}}{Q_{sw}}$$

Om egen utspädningsfaktor har valts:

$$DF_{sw} = \frac{1}{IDF_{sw_user}}$$

Transportmodell 5: Till grönsaker

Historik A

Om BCF_{stem_d} och BCF_{root_d} finns:

$$K_{pl} = r_{stem} \cdot BCF_{stem_d} \cdot f_{leaf} + r_{root} \cdot BCF_{root_d} \cdot f_{root}$$

där BCF_{stem_d} och BCF_{root_d} är ämnesspecifika värden från databas.

Om metall:

Om BCF_{stem_d} och/eller BCF_{root_d} saknas: $K_{pl} = -88$

Om övrigt oorganiskt ämne:

Om BCF_{stem_d} och/eller BCF_{root_d} saknas: $BCF_{stem_f} = 1 - r_{stem}$

$$BCF_{root_f} = 1 - r_{root}$$

Annars:

$$K_{pl} = (BCF_{stem_f} \cdot f_{leaf} + BCF_{root_f} \cdot f_{root}) \cdot \frac{\rho_b}{\Theta_w + K_d \cdot \rho_b + H \cdot \Theta_a}$$

Historik D

Om organiskt ämne:

Om BCF_{stem_d} och/eller BCF_{root_d} saknas:

Om K_{ow} saknas: $BCF_{stem_f} = 0$

Om K_{ow} finns:

$$BCF_{stem_f} = \frac{TSCF \left(\frac{Q_{leaf}}{V_{leaf}} \right) + H \cdot f \cdot g_{leaf} \cdot \left(\frac{A_{leaf}}{V_{leaf}} \right)}{\frac{A_{leaf} \cdot g_{leaf} \cdot H}{(F_{water,leaf} + F_{fat,leaf} \cdot K_{ow}^{b_{leaf}}) \cdot V_{leaf}} + k_{G,leaf}} \cdot \frac{1000}{\rho_{leaf}} + \frac{DP \cdot r_{stem}}{\frac{\rho_b}{\Theta_w + K_d \cdot \rho_b + H \cdot \Theta_a}}$$

där:

$$TSCF = \text{MAX} \left\{ 0.784 \cdot \exp \left[\frac{-(\log K_{ow}^* - 1.78)^2}{2.44} \right], 0.7 \cdot \exp \left[\frac{-(\log K_{ow}^* - 3.07)^2}{2.78} \right] \right\}$$

$$K_{ow}^* = \text{MAX} \left\{ K_{ow,min}, \text{MIN} \left\{ K_{ow,max}, K_{ow} \right\} \right\}$$

$$F_{water,leaf} = (1 - r_{stem}) \frac{\rho_{leaf}}{1000}$$

Om K_{ow} saknas eller = 0: $BCF_{root_f} = 0$

Om K_{ow} finns:

$$K_{plant_water} = 10^{(b_{root} \cdot \log K_{ow} + \log F_{fat,root})} + F_{water,root}$$

$$BCF_{root_f} = \frac{Q_{root}}{\frac{Q_{root}}{K_{plant_water}} + k_{G+E,root} \cdot V_{root}}$$

$$F_{water,root} = (1 - r_{root}) \frac{\rho_{root}}{1000}$$

$$K_{pl} = (BCF_{stem_f} \cdot f_{leaf} + BCF_{root_f} \cdot f_{root}) \cdot \frac{\rho_b}{\Theta_w + K_d \cdot \rho_b + H \cdot \Theta_a}$$

Om BCF-värden finns i ämnesdatabasen så används de i första hand. Om BCF saknas i ämnesdatabasen så beräknas värdena. För metaller måste dock BCF-värden finnas i ämnesdata-basen, i annat fall beaktas inte exponeringsvägen. Om BCF finns i ämnesdatabasen men öns-kas ändras kan ett nytt ämne skapas med andra BCF-värden angivna.

Exponeringsberäkningar

I Exponeringsmodell 1 till 6 beräknas exponering till människor från den förorenade marken genom intag av jord, hudkontakt, inandning av damm eller ångor, intag av dricksvatten eller växter.

De variabler som används är:

- Ämnesspecifika (t.ex. *TDI*, *RfC*, *RISK_{or}*).
- Scenariospecifika (t.ex. vistelsetid på området: exponeringstid).
- Modellspecifika data (t.ex. kroppsvikt, hudexponering för jord, halt inandningsbart damm m.m.).

Vissa parametrar klassificeras som modellspecifika, men två alternativa värden ges; ett som motsvarar förhållande vid känslig markanvändning, *KM*, och ett som motsvarar förhållandena vid mindre känslig markanvändning, *MKM*. Dessa redovisas i tabellen nedan:

Generellt namn	KM-version	MKM-version	Modell
<i>SI_{child}</i>	<i>SI_{child_KM}</i>	<i>SI_{child_MKM}</i>	EM1
<i>SI_{adult}</i>	<i>SI_{adult_KM}</i>	<i>SI_{adult_MKM}</i>	EM1
<i>A_{child}</i>	<i>A_{child_KM}</i>	<i>A_{child_MKM}</i>	EM2
<i>A_{adult}</i>	<i>A_{adult_KM}</i>	<i>A_{adult_MKM}</i>	EM2
<i>T_{exp}</i>	<i>t_{exp_KM}</i>	<i>t_{exp_MKM}</i>	EM3, EM4
<i>T_{child}</i>	<i>T_{child_KM}</i>	<i>T_{child_MKM}</i>	EM1-EM6
<i>T_{adult}</i>	<i>T_{adult_KM}</i>	<i>T_{adult_MKM}</i>	EM1-EM6

Exponeringsmodell 1: Intag av jord

Historik A

$$R_{is_long} = MAX \left\{ \frac{SI_{child} \cdot t_{is_child}}{365 \cdot m_{child}}, \frac{SI_{adult} \cdot t_{is_adult}}{365 \cdot m_{adult}} \right\}$$

$$R_{is_int} = \frac{1}{365 \cdot T_{int}} \left[T_{child} \cdot \frac{SI_{child} \cdot t_{is_child}}{m_{child}} + T_{adult} \cdot \frac{SI_{adult} \cdot t_{is_adult}}{m_{adult}} \right]$$

BERÄKNING AV ENVÄGSKONCENTRATION

Historik A, C, E

Om exponeringsvägen valts:

Om endast TDI finns men $RISK_{or}$ saknas:
$$C_{is} = \frac{TDI \cdot (1 - f_{os})}{f_{bio_or} \cdot R_{is_long}} \cdot 10^6$$

Om TDI saknas men $RISK_{or}$ finns:
$$C_{is} = \frac{RISK_{or}}{f_{bio_or} \cdot R_{is_int}} \cdot 10^6$$

Om både TDI och $RISK_{or}$ finns:

$$C_{is} = MIN \left\{ \frac{TDI \cdot (1 - f_{os})}{f_{bio_or} \cdot R_{is_long}} \cdot 10^6, \frac{RISK_{or}}{f_{bio_or} \cdot R_{is_int}} \cdot 10^6 \right\}$$

Om både TDI eller $RISK_{or}$ saknas: $C_{is} = -88$ Meddelas att data saknas.

Om exponeringsvägen inte valts:

$C_{is} = -99$ Meddelas att exponeringsvägen inte beaktas.

Om division med noll då C_{is} beräknas: $C_{is} = -88$ Meddelas att data saknas.

Exponeringsmodellen har förberetts för att ta hänsyn till relativ biotillgänglighet med faktorn f_{bio_or} .

Exponeringsmodell 2: Hudkontakt

Historik A

$$R_{du_long} = MAX \left\{ \frac{SE_{child} \cdot A_{child} \cdot t_{du_child}}{365 \cdot m_{child}}, \frac{SE_{adult} \cdot A_{adult} \cdot t_{du_adult}}{365 \cdot m_{adult}} \right\}$$

$$R_{du_int} = \frac{1}{365 \cdot T_{int}} \left[T_{child} \cdot \frac{SE_{child} \cdot A_{child} \cdot t_{du_child}}{m_{child}} + T_{adult} \cdot \frac{SE_{adult} \cdot A_{adult} \cdot t_{du_adult}}{m_{adult}} \right]$$

BERÄKNING AV ENVÄGSKONCENTRATION

Historik A, C, E

Om exponeringsvägen valts:

Om f_{du} finns:

Om TDI finns men $RISK_{or}$ saknas:
$$C_{du} = \frac{TDI \cdot (1 - f_{os})}{f_{du} \cdot f_{bio_du} \cdot R_{du_long}} \cdot 10^6$$

Om TDI saknas men $RISK_{or}$ finns:
$$C_{du} = \frac{RISK_{or}}{f_{du} \cdot f_{bio_du} \cdot R_{du_int}} \cdot 10^6$$

Om både TDI och $RISK_{or}$ finns:

$$C_{du} = MIN \left\{ \frac{TDI \cdot (1 - f_{os})}{f_{du} \cdot f_{bio_du} \cdot R_{du_long}} \cdot 10^6, \frac{RISK_{or}}{f_{du} \cdot f_{bio_du} \cdot R_{du_int}} \cdot 10^6 \right\}$$

Om både TDI och $RISK_{or}$ saknas: $C_{du} = -88$ Meddelas att data saknas.

Om f_{du} saknas:

$C_{du} = -88$ Meddelas att data saknas.

Om exponeringsvägen inte valts:

$C_{du} = -99$ Meddelas att exponeringsvägen inte beaktas.

Om division med noll då C_{du} beräknas: $C_{du} = -88$ Meddelas att data saknas.

Exponeringsmodellen har förberetts för att ta hänsyn till biotillgänglighet. Den nya faktorn f_{bio_du} (relativ biotillgänglighet av ämnet) har införts som komplement till f_{du} (skillnad i biotillgänglighet vid hudupptag jämfört med oralt upptag)-

Exponeringsmodell 3: Inandning av damm

Historik A, C

$$f_{t_out_id} = 1 - f_{t_in_id}$$

$$C_{ad} = C_{d_in} f_{dust} \cdot f_{d_in} \cdot f_{t_in_id} + C_{d_out} f_{dust} \cdot f_{d_out} \cdot f_{t_out_id}$$

$$f_{id_exp} = MAX \left\{ \frac{t_{id_child}}{365}, \frac{t_{id_adult}}{365} \right\} t_{exp}$$

$$R_{id_long} = MAX \left\{ \frac{C_{ad} \cdot BR_{child} \cdot LR_{child} \cdot t_{id_child}}{365 \cdot m_{child}}, \frac{C_{ad} \cdot BR_{adult} \cdot LR_{adult} \cdot t_{id_adult}}{365 \cdot m_{adult}} \right\} t_{exp}$$

$$R_{id_int} = \frac{1}{365 \cdot T_{int}} \left[T_{child} \cdot \frac{C_{ad} \cdot BR_{child} \cdot LR_{child} \cdot t_{id_child}}{m_{child}} + T_{adult} \cdot \frac{C_{ad} \cdot BR_{adult} \cdot LR_{adult} \cdot t_{id_adult}}{m_{adult}} \right] t_{exp}$$

BERÄKNING AV ENVÄGSKONCENTRATION

Historik A, C, E

Om exponeringsvägen valts:

Om RfC finns och $RISK_{inh}$ saknas:
$$C_{id} = \frac{RfC \cdot (1 - f_{os})}{f_{id_exp} \cdot f_{bio_inh} \cdot C_{ad}} \cdot 10^6$$

Om RfC saknas men $RISK_{inh}$ finns:
$$C_{id} = \frac{RISK_{inh}}{f_{id_exp} \cdot f_{bio_inh} \cdot C_{ad}} \cdot 10^6$$

Om både RfC och $RISK_{inh}$ finns:

$$C_{id} = MIN \left\{ \frac{RfC \cdot (1 - f_{os})}{f_{id_exp} \cdot f_{bio_inh} \cdot C_{ad}} \cdot 10^6, \frac{RISK_{inh}}{f_{id_exp} \cdot f_{bio_inh} \cdot C_{ad}} \cdot 10^6 \right\}$$

Om både RfC och $RISK_{in}$ saknas:

Om TDI finns och $RISK_{or}$ saknas:
$$C_{id} = \frac{TDI \cdot (1 - f_{os})}{f_{bio_inh} \cdot R_{id_long}} \cdot 10^6$$

Om TDI saknas men $RISK_{or}$ finns:
$$C_{id} = \frac{RISK_{or}}{f_{bio_inh} \cdot R_{id_int}} \cdot 10^6$$

Om både TDI och $RISK_{or}$ finns:

$$C_{id} = MIN \left\{ \frac{TDI \cdot (1 - f_{os})}{f_{bio_inh} \cdot R_{id_long}} \cdot 10^6, \frac{RISK_{or}}{f_{bio_inh} \cdot R_{id_int}} \cdot 10^6 \right\}$$

Om både TDI och $RISK_{or}$ saknas: $C_{id} = -88$ Meddelas att data saknas.

Om exponeringsvägen inte valts: $C_{id} = -99$ Meddelas att exponeringsvägen inte beaktas.

Om division med noll då C_{id} beräknas: $C_{id} = -88$ Meddelas att data saknas.

Exponeringsmodellen har förberetts för att ta hänsyn till biotillgänglighet, med faktorn f_{bio_inh} .

Exponeringsmodell 4: Inandning av ånga

Historik A

$$f_{t_out_iv} = 1 - f_{t_in_iv}$$

$$f_{iv_exp} = MAX \left\{ \frac{t_{iv_child}}{365}, \frac{t_{iv_adult}}{365} \right\} t_{exp}$$

$$R_{iv_long} = MAX \left\{ \frac{1000 \cdot BR_{child} \cdot t_{iv_child}}{365 \cdot m_{child}}, \frac{1000 \cdot BR_{adult} \cdot t_{iv_adult}}{365 \cdot m_{adult}} \right\} t_{exp}$$

$$R_{iv_int} = \frac{1000}{365 \cdot T_{int}} \left[T_{child} \cdot \frac{BR_{child} \cdot t_{iv_child}}{m_{child}} + T_{adult} \cdot \frac{BR_{adult} \cdot t_{iv_adult}}{m_{adult}} \right] t_{exp}$$

BERÄKNING AV ENVÄGSKONCENTRATION

Historik A, C, E

Om exponeringsvägen valts:

Om organiskt ämne eller om H finns:

Om RfC finns och $RISK_{inh}$ saknas:

$$C_{iv} = \frac{RfC \cdot (1 - f_{os})}{f_{iv_exp} \cdot CF_{air} \cdot (f_{t_in_iv} \cdot DF_{tot_ia} + f_{t_out_iv} \cdot DF_{oa})} \cdot \frac{1}{1000}$$

Om RfC saknas men $RISK_{in}$ finns:

$$C_{iv} = \frac{RISK_{inh}}{f_{iv_exp} \cdot CF_{air} \cdot (f_{t_in_iv} \cdot DF_{tot_ia} + f_{t_out_iv} \cdot DF_{oa})} \cdot \frac{1}{1000}$$

Om både RfC och $RISK_{in}$ finns:

$$C_{iv} = MIN \left\{ \frac{RfC \cdot (1 - f_{os})}{f_{iv_exp} \cdot CF_{air} \cdot (f_{t_in_iv} \cdot DF_{tot_ia} + f_{t_out_iv} \cdot DF_{oa})} \cdot \frac{1}{1000}, \frac{RISK_{inh}}{f_{iv_exp} \cdot CF_{air} \cdot (f_{t_in_iv} \cdot DF_{tot_ia} + f_{t_out_iv} \cdot DF_{oa})} \cdot \frac{1}{1000} \right\}$$

Om både RfC och $RISK_{in}$ saknas:

Om TDI finns och $RISK_{or}$ saknas:

$$C_{iv} = \frac{TDI \cdot (1 - f_{os})}{R_{iv_long} \cdot CF_{air} \cdot (f_{t_in_iv} \cdot DF_{tot_ia} + f_{t_out_iv} \cdot DF_{oa})}$$

Om TDI saknas men $RISK_{or}$ finns:

$$C_{iv} = \frac{RISK_{or}}{R_{iv_int} \cdot CF_{air} \cdot (f_{t_in_iv} \cdot DF_{tot_ia} + f_{t_out_iv} \cdot DF_{oa})}$$

Om både TDI och $RISK_{or}$ finns:

$$C_{iv} = MIN \left\{ \frac{TDI \cdot (1 - f_{os})}{R_{iv_long} \cdot CF_{air} \cdot (f_{t_in_iv} \cdot DF_{tot_ia} + f_{t_out_iv} \cdot DF_{oa})}, \frac{RISK_{or}}{R_{iv_int} \cdot CF_{air} \cdot (f_{t_in_iv} \cdot DF_{tot_ia} + f_{t_out_iv} \cdot DF_{oa})} \right\}$$

Om både TDI och $RISK_{or}$ saknas:

$$C_{iv} = -88 \quad \text{Meddelas att data saknas.}$$

Om oorganiskt ämne och H saknas:

$$C_{iv} = -99 \quad \text{Meddelas att exponeringsvägen inte beaktas.}$$

Om exponeringsvägen inte valts:

$$C_{iv} = -99 \quad \text{Meddelas att exponeringsvägen inte beaktas.}$$

Om division med noll då C_{iv} beräknas: $C_{iv} = -88$ Meddelas att data saknas.

OBS! Biotillgänglighetsfaktor finns inte medtagen för denna exponeringsväg eftersom det rör sig om ångfas där biotillgängligheten knappast kan variera.

Exponeringsmodell 5: Intag av dricksvatten

Historik A

$$R_{iv_long} = MAX \left\{ \frac{WC_{child}}{m_{child}}, \frac{WC_{adult}}{m_{adult}} \right\}$$

$$R_{iw_int} = \frac{1}{T_{int}} \left[T_{child} \cdot \frac{WC_{child}}{m_{child}} + T_{adult} \cdot \frac{WC_{adult}}{m_{adult}} \right]$$

BERÄKNING AV ENVÄGSKONCENTRATION

Historik A, C, E

Om exponeringsvägen valts:

Om TDI finns och $RISK_{or}$ saknas:
$$C_{iw} = \frac{TDI \cdot (1 - f_{os})}{R_{iw_long} \cdot CF_{water_mob} \cdot DF_{gw_well}}$$

Om TDI saknas men $RISK_{or}$ finns:
$$C_{iw} = \frac{RISK_{or}}{R_{iw_int} \cdot CF_{water_mob} \cdot DF_{gw_well}}$$

Om både TDI och $RISK_{or}$ finns:

$$C_{iw} = MIN \left\{ \frac{TDI \cdot (1 - f_{os})}{R_{iw_long} \cdot CF_{water_mob} \cdot DF_{gw_well}}, \frac{RISK_{or}}{R_{iw_int} \cdot CF_{water_mob} \cdot DF_{gw_well}} \right\}$$

Om både TDI och $RISK_{or}$ saknas: $C_{iw} = -88$ Meddelas att data saknas.

Om exponeringsvägen inte valts:

$C_{iw} = -99$ Meddelas att exponeringsvägen inte beaktas.

Om division med noll då C_{iw} beräknas: $C_{iw} = -88$ Meddelas att data saknas.

OBS! Biotillgänglighetsfaktor finns inte med för denna exponeringsväg eftersom det rör sig om vattenfas där relativa biotillgängligheten kan antas vara 100 %.

Exponeringsmodell 6: Intag av grönsaker

Historik A

$$R_{ig_long} = MAX \left\{ \frac{CV_{child} \cdot t_{ig_child}}{365 \cdot m_{child}}, \frac{CV_{adult} \cdot t_{ig_adult}}{365 \cdot m_{adult}} \right\}$$

$$R_{ig_int} = \frac{1}{365 \cdot T_{int}} \left[T_{child} \cdot \frac{CV_{child} \cdot t_{ig_child}}{m_{child}} + T_{adult} \cdot \frac{CV_{adult} \cdot t_{ig_adult}}{m_{adult}} \right]$$

BERÄKNING AV ENVÄGSKONCENTRATION

Historik A, C, E

Om exponeringsvägen valts:

Om K_{pl} finns:

Om endast TDI finns men $RISK_{or}$ saknas:

$$C_{ig} = \frac{TDI \cdot (1 - f_{os})}{R_{ig_long} \cdot f_{bio_veg} \cdot f_h \cdot K_{pl}}$$

Om TDI saknas men $RISK_{or}$ finns:

$$C_{ig} = \frac{RISK_{or}}{R_{ig_int} \cdot f_{bio_veg} \cdot f_h \cdot K_{pl}}$$

Om både TDI och $RISK_{or}$ finns:

$$C_{is} = MIN \left\{ \frac{TDI \cdot (1 - f_{os})}{R_{ig_long} \cdot f_{bio_veg} \cdot f_h \cdot K_{pl}}, \frac{RISK_{or}}{R_{ig_int} \cdot f_{bio_veg} \cdot f_h \cdot K_{pl}} \right\}$$

Om både TDI och $RISK_{or}$ saknas:

$$C_{ig} = -88 \quad \text{Meddelas att data saknas.}$$

Om K_{pl} saknas:

$$C_{ig} = -88 \quad \text{Meddelas att data saknas.}$$

Om exponeringsvägen inte valts:

$$C_{ig} = -99 \quad \text{Meddelas att exponeringsvägen inte beaktas.}$$

Om division med noll då C_{ig} beräknas: $C_{ig} = -88$ Meddelas att data saknas.

Modeller av miljöeffekter

Historik A

SKYDD AV MARKMILJÖ (ON-SITE)

Om det aktuella scenariot är ett KM-scenario:

$$\text{Om } E_{KM} \text{ finns: } E_{onsite} = E_{KM}$$

$$\text{Om } E_{KM} \text{ saknas: } E_{onsite} = -88 \quad \text{Meddelas att data saknas.}$$

Om det aktuella scenariot är ett MKM-scenario:

$$\text{Om } E_{MKM} \text{ finns: } E_{onsite} = E_{MKM}$$

$$\text{Om } E_{MKM} \text{ saknas: } E_{onsite} = -88 \quad \text{Meddelas att data saknas.}$$

Modell för skydd av grundvatten och ytvatten

Historik D

BERÄKNING AV SKYDD FÖR GRUNDVATTEN

Om denna justering har valts:

$$\text{Om } C_{crit_gw} \text{ finns: } C_{GW} = \frac{C_{crit_gw}}{CF_{water_mob} \cdot DF_{gw_protect}}$$

$$\text{Om } C_{crit_gw} \text{ saknas: } C_{GW} = -88 \quad \text{Meddelas att data saknas.}$$

Om denna justering inte har valts: $C_{GW} = -99$ Meddelas att detta inte beaktas.

BERÄKNING AV SKYDD FÖR YTVATTEN

Historik A, C

$$\text{Om } C_{crit_sw} \text{ finns: } E_{offsite} = \frac{C_{crit_sw} \cdot 10^{-3}}{CF_{water_mob} \cdot DF_{sw}}$$

$$\text{Om } C_{crit_sw} \text{ saknas: } E_{offsite} = -88 \quad \text{Meddelas att data saknas.}$$

OBS! Skydd av ytvatten kommer alltid att beaktas. Den enda möjligheten att frångå detta är att definiera ett eget ämne där C_{crit} saknas.

Riktvärdesberäkning och justeringar

Historik A, C

$$\text{Om } C_{is} > 0: \quad CC_{is} = \frac{I}{C_{is}}$$

$$\text{Om } C_{is} \leq 0: \quad CC_{is} = 0$$

$$\text{Om } C_{du} > 0: \quad CC_{du} = \frac{I}{C_{du}}$$

$$\text{Om } C_{du} \leq 0: \quad CC_{du} = 0$$

$$\text{Om } C_{id} > 0: \quad CC_{id} = \frac{I}{C_{id}}$$

$$\text{Om } C_{id} \leq 0: \quad CC_{id} = 0$$

$$\text{Om } C_{iv} > 0: \quad CC_{iv} = \frac{1}{C_{iv}}$$

$$\text{Om } C_{iv} \leq 0: \quad CC_{iv} = 0$$

$$\text{Om } C_{iw} > 0: \quad CC_{iw} = \frac{1}{C_{iw}}$$

$$\text{Om } C_{iw} \leq 0: \quad CC_{iw} = 0$$

$$\text{Om } C_{ig} > 0: \quad CC_{ig} = \frac{1}{C_{ig}}$$

$$\text{Om } C_{ig} \leq 0: \quad CC_{ig} = 0$$

Beräkning av ojusterat hälsoriskbaserat riktvärde:

$$C_{unadj} = \frac{1}{CC_{is} + CC_{du} + CC_{id} + CC_{iv} + CC_{iw} + CC_{ig}}$$

JUSTERING FÖR AKUTTOXICITET OCH KORTTIDSEXPONERING

Historik A, C, E

Om denna justering har valts:

$$\text{Om } TDAE \text{ finns: } C_{adj_acute} = \frac{TDAE \cdot m_{small_child}}{m_{intake}} \cdot 10^6$$

$$\text{Om } TDAE \text{ saknas: } C_{adj_acute} = -88 \quad \text{Meddelas att data saknas.}$$

Om denna justering inte har valts: $C_{adj_acute} = -99$ Meddelas att justering inte beaktas.

Justerat hälsoriskbaserat riktvärde:

$$C_{adj_health} = \text{MIN}\{C_{unadj}, C_{adj_acute}, C_{short_term}\}$$

JUSTERAT HUMAN- OCH MILJÖEFFEKTSVÄRDE (FÖRE JUSTERING FÖR BAKGRUNDSHALT)

Historik A, C

$$C_{gl_unadj} = \text{MIN}\{C_{adj_health}, C_{free_phase}, C_{adj_gw}, E_{onsite}, E_{offsite}\}$$

JUSTERING FÖR HÖG BAKGRUNDSHALT

Historik A

Om denna justering har valts: $C_{adj_bc} = C_{bc_nat}$

Om denna justering inte har valts: $C_{adj_bc} = -99$ Meddelas att detta inte beaktas.

SLUTLIG JUSTERING AV RIKTVÄRDE

$$C_{guideline} = MAX \{ C_{gl_unadj}, C_{adj_bc} \}$$

Meddelas vilken justering som är styrande.

Koncentrationer och mängder

BERÄKNING MED UTGÅNGSPUNKT FRÅN VERKLIG HALT I JORD

Historik D

Halt i porvatten: $C_{w_por} = C_{real} \cdot CF_{water}$

Om division med noll då C_{w_por} beräknas: $C_{w_por} = -88$

Halt mobil förorening i porvatten: $C_w = C_{real} \cdot CF_{water_mob}$

Om division med noll då C_w beräknas: $C_w = -88$

Om skydd av grundvatten valts: $C_{gw_protect} = C_w \cdot DF_{gw_protect}$

Om skydd av grundvatten inte valts: $C_{gw_protect} = -99$

Om division med noll då $C_{gw_protect}$ beräknas: $C_{gw_protect} = -88$

Om exp.väg ”intag av dricksvatten” valts: $C_{gw_well} = C_w \cdot DF_{gw_well}$

Om exp.väg ”intag av dricksvatten” inte valts: $C_{gw_well} = -99$

Om division med noll då C_{gw_well} beräknas: $C_{gw_well} = -88$

Om ”off-site miljöeffekter” kan beräknas (C_{crit_sw} finns):

$$\text{Halt i ytvatten: } C_{sw} = C_w \cdot DF_{sw}$$

$$\text{Mängd till ytvatten: } m_{out} = Q_{gw_out} \cdot C_w \cdot 3,6 \cdot 24 \cdot 365$$

Om ”off-site miljöeffekter” inte kan beräknas (C_{crit_sw} saknas):

$$C_{sw} = -99$$

$$m_{out} = -99$$

Om division med noll då C_{sw} beräknas: $C_{sw} = -88$

Om division med noll då m_{out} beräknas: $m_{out} = -88$

Halt i porluft: $C_a = C_{real} \cdot CF_{air} \cdot 10^3$

Om division med noll då C_a beräknas: $C_a = -88$

Om exp.väg ”inandning av ånga” valts:

Halt i inomhusluft: $C_{ia} = C_a \cdot DF_{ia}$

Halt i utomhusluft: $C_{oa} = C_a \cdot DF_{oa}$

Om exp.väg ”inandning av ånga” inte valts:

$C_{ia} = -99$

$C_{oa} = -99$

Om division med noll då C_{ia} beräknas: $C_{ia} = -88$

Om division med noll då C_{oa} beräknas: $C_{oa} = -88$

Om exp.väg ”intag av grönsaker” valts:

Halt i blad- och stjälgroönsaker (torrvikt):

Om BCF_{stem_d} finns: $C_{stem} = BCF_{stem_d} \cdot C_{real}$

Om BCF_{stem_d} saknas:

Om metall: $C_{stem} = -88$

Om icke-metall: $C_{stem} = \frac{BCF_{stem_f}}{r_{stem}} \cdot C_w$

Halt i rotgrönsaker (torrvikt):

Om BCF_{root_d} finns: $C_{root} = BCF_{root_d} \cdot C_{real}$

Om BCF_{root_d} saknas:

Om metall: $C_{root} = -88$

Om icke-metall: $C_{root} = \frac{BCF_{root_f}}{r_{root}} \cdot C_w$

Om division med noll då C_{stem} beräknas: $C_{stem} = -88$

Om division med noll då C_{root} beräknas: $C_{root} = -88$

Om halt i fisk ska uppskattas:

Om organiskt ämne:

Om $K_{ow} > 10^6$: $BCF_{fish} = I_{fish} \cdot 10^6$

Om $K_{ow} \leq 10^6$: $BCF_{fish} = I_{fish} \cdot K_{ow}$

Om oorganiskt ämne (inkl. metall):

Om BCF_{fish} saknas: $BCF_{fish} = -88$

Om BCF_{fish} finns: BCF_{fish} i ämnesdatabasen används.

Halt i fisk: $C_{if} = C_{sw} \cdot BCF_{fish}$