

Sleutelfactor Toxiciteit



Het verbeterde Chemie-spoor van de ecologische sleutelfactor Toxiciteit, versie 2.0

Diagnose van impacts van chemische verontreiniging volgens het Chemie-spoor van de sleutelfactor toxiciteit

Achtergronddocument beschikbare kennis bij de sleutelfactor Toxiciteit

Auteurs:

Leo Posthuma (RIVM)
Leonard Osté (Deltares)
Erik Dekker (RIVM)
Remon Koopman (RIVM)
Jaap Slootweg (RIVM)

Contact: leo.posthuma@rivm.nl

Datum: 30 oktober 2021

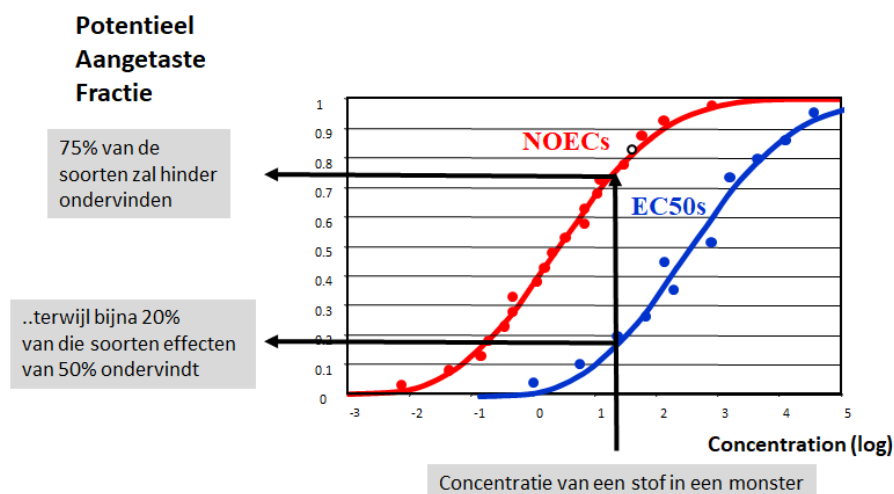
Bij verwijzing naar deze notitie graag de volgende gegevens gebruiken:
Posthuma, L., et al. (2021). Het verbeterde Chemie-spoor van de ecologische sleutelfactor Toxiciteit, versie 2.0. Diagnose van impacts van chemische verontreiniging volgens het Chemie-spoor van de sleutelfactor toxiciteit. Achtergronddocument beschikbare kennis bij de sleutelfactor Toxiciteit. Versie 1, 30 oktober 2021. KIWK-Toxiciteit Notitie C6. Amersfoort, the Netherlands. Kennis Impuls Water Kwaliteit.



Highlights

1. Het Chemie-spoor van de sleutelfactor Toxiciteit is verbeterd
2. De inhoudelijke verbetering bestaat uit het actualiseren van de kennis over effecten van stoffen en mengsels in watersystemen
3. De technische verbetering bestaat uit het bruikbaar maken van die kennis via een rekentool op de SFT2-website
4. De verbetering voor de uiteindelijke toepassing in de praktijk bestaat uit de indeling van de chemische verontreiniging in een vijfklassen-systeem
5. Dat systeem is afgeleid van de vijfklassen-indeling voor de ecologische toestand
6. Door de verbeteringen kunnen waterbeheerders maatregelen tegen chemische verontreiniging afleiden en prioriteren.

Grafische samenvatting



Chemische verontreiniging bestaat uit door menselijk handelen verhoogde concentraties van chemische stoffen, die vaak als mengsel vóórkomen. Het behalen van doelen van de KRW en het prioriteren van maatregelen wordt het best ondersteund door goed inzicht in de mate van effecten van mengsels. Het Chemie-spoor van de ecologische sleutelfactor Toxiciteit wordt toegepast om de mate van effect van stoffen, stofgroepen en totale mengsels te kwantificeren, als basis om maatregelen te prioriteren.



Inhoudsopgave

Highlights	2
Grafische samenvatting	2
Inhoudsopgave	3
Samenvatting	4
1 Inleiding	5
1.1 Praktische problemen met stoffen	5
1.2 Beoordeling van chemische verontreinigingen	5
1.2.1 Huidige KRW-beoordeling	5
1.2.2 Aanvulling op- en praktijkeffecten van de huidige KRW-beoordeling.....	5
1.2.3 Bijstelling geïndiceerd door Europese Commissie.....	6
1.3 De beoordeling van chemische verontreiniging als belemmerende sleutelfactor	6
1.4 De basis van de toxische druk berekening	7
1.5 Inhoud van deze KIWK-Notitie	8
2 Wetenschappelijke basis van het Chemie-spoor	10
2.1 Historie en beginselen	10
2.2 Conceptuele aansluiting tussen normstelling en toxische druk	10
2.3 Aantal stoffen met ecotoxiciteitsgegevens	11
2.4 Twee soorten toxische druk per stof.....	12
2.5 Basale validiteit: SSD-NOECs en het KRW-beschermdoel.....	13
2.6 Basale interpretatie: SSD-EC50s en soortenverlies.....	13
2.7 Samenvattende interpretatie voor praktijktoepassingen.....	14
2.8 Van concentratie naar interpretatie.....	15
3 Stappenplan voor het bepalen van de toxische druk	17
3.1 Motivatie voor (ook) een stappenplan	17
3.2 Overzicht van de stappen	17
3.3 Representatieve verzameling van stoffen.....	18
3.4 Verzamelen van monitoringdata of voorspelde concentraties.....	19
3.5 Biologische beschikbaarheid.....	19
3.6 Onderscheid natuurlijke en synthetische stoffen	20
3.7 Toxische druk per stof.....	20
3.8 Toxische druk per stofgroep.....	21
3.9 Toxische druk van totale mengsels.....	22
3.10 Wetenschappelijke onzekerheden en praktische zekerheden	23
3.11 Interpretatie, prioritering en kartering	23
3.12 Specifieke situaties	24
3.12.1 Interpretatie vraagt specifieke aandacht	24
3.12.2 Specifieke data, stoffen en stofgroepen.....	25
4 Voorbeelden van toepassingen.....	26
4.1 Overzicht	26
4.2 Verkennend prognostisch karteren voor de EU.....	26
4.3 Verkennend prognostisch karteren voor Nederland	27
4.4 Verkennend diagnostisch karteren	28
4.5 Onderzoek aan relatieve dominantie van bronnen	29
4.6 Onderzoek aan relatieve dominantie van stofgroepen.....	30
4.7 Evalueren van het effect van maatregelen.....	30
Colofon.....	31
Referenties.....	32



Samenvatting

Deze KIWK-notitie beschrijft de wetenschappelijke en praktische basis van het Chemie-spoor van de ecologische sleutel factor toxiciteit (ESFT). De ESFT is één van de beschikbare en valide werkwijzen die waterbeheerders kunnen toepassen om een diagnose te stellen over mate waarin chemische verontreinigingen in een beheergebied het handhaven of herstel van (minimaal) een goede ecologische toestand belemmeren. Een goede waterkwaliteit kan gehandhaafd of bereikt worden door goede maatregelen, die gebaseerd zijn op een goede diagnose van de oorzaken van een dreigende of actuele vermindering van de waterkwaliteit. In het Chemie-spoor van de ESFT wordt uitgaande van concentraties van stoffen wordt afgeleid wat de toxische druk is van afzonderlijke stoffen, stofgroepen, en complete mengsels. Onderzoek heeft aangetoond dat de toenemende waarde van de toxische druk tussen monsters (in ruimte en/of tijd) samengaat met een toename van de mate van belemmering in het handhaven of bereiken van (tenminste) de goede ecologische toestand. Omdat de toxische druk dus geschaald is op de ecologische status wordt de waterbeheerder in staat gesteld om een integrale diagnose van de oorzaken van verlaagde ecologische toestand uit te voeren. Dus: alle drukfactoren, inclusief de toxische druk. De gegevens uit het Chemie-spoor kunnen hiernaast ook worden gecombineerd met gegevens uit het Toxicologie-spoor, omdat ook dat spoor inzichten oplevert in de diagnose van de rol van chemische verontreinigingen bij het veroorzaken van effecten op de waterkwaliteit.

Noot: omdat de sleutelfactor toxiciteit geactualiseerd wordt, en ook de kennis voor deze notitie toeneemt, kan deze notitie geactualiseerd worden.



1 Inleiding

1.1 Praktische problemen met stoffen

De Kaderrichtlijn Water (KRW) is actiegericht: als de waterkwaliteit bedreigd wordt door voorgenomen menselijke activiteiten, of als de waterkwaliteit minder is (of dreigt te worden) dan ‘goed’, dan moeten waterbeheerders maatregelen nemen die de waterkwaliteit beschermen, of de effecten die al bestaan tenietdoen. Chemische verontreinigingen vormen een vaak voorkomend en relevant probleem in het praktische waterbeheer (EEA, 2018; Posthuma et al., 2021b). Chemische verontreinigingen in de oppervlaktewateren van Europa en Nederland blijken namelijk duidelijk te leiden tot een verlaagde ecologische status (Posthuma et al., 2020) en een verhoogde zuiveringsopgave (Pronk, Vries et al. 2020). Anders gezegd: mengsels van toxische stoffen zijn belemmerend voor het bereiken van de doelen van de KRW.

1.2 Beoordeling van chemische verontreinigingen

1.2.1 Huidige KRW-beoordeling

De huidige beoordeling van chemische verontreinigingen is voor Nederland in de praktijk onder de KRW gericht op de stoffen die zijn geprioriteerd vanwege het brede vóórkomen hetzij in de EU (“Prioritaire Stoffen”; 45 stoffen; EC (2013)) hetzij de Nederlandse stroomgebieden (“Specifieke stoffen”; ca. 100 stoffen; Ministerie I&W (2017)). Deze stoffen zijn via prioriteringsmethodieken op beide stoffenlijsten geplaatst, maar ze dekken slechts een fractie van de meer dan 170.000 stoffen die in Europa in de handel zijn. Bij de beoordeling van de waterkwaliteit van een locatie wordt geëvalueerd of de concentratie van een stof hoger is dan diens milieu kwaliteits norm (MKN), en volgt indeling in de klassen ‘voldoet’ of ‘voldoet niet’. Door toepassing van het zogenoemde ‘one out, all out’ principe wordt de uiteindelijke samenvatting van de chemische beoordeling samengevat, en is chemische verontreiniging een probleem (“voldoet niet”) als er tenminste één stof aanwezig is boven diens MKN. De prioritering die gebruikt is om de stoffen te selecteren waarvoor deze beoordeling gewoonlijk wordt uitgevoerd is afgeleid van risico-quotiënten van de betreffende stoffen (de gemeten concentraties die gedeeld wordt door de beschermende Europese of Nederlandse norm voor mens en milieu) en de frequentie waarin de stoffen vóórkomen in concentraties boven hun beleidsmatig vastgestelde norm.

1.2.2 Aanvulling op- en praktijkeffecten van de huidige KRW-beoordeling

Een internationale groep wetenschappers heeft aanvullend inmiddels voor meer dan 60.000 stoffen een voorstel voor een beschermende norm – zonder de beleidsmatig vastgestelde status – afgeleid (Dulio and Von der Ohe (2013), <https://www.norman-network.com/nds/ecotox/>¹). Vanwege het ‘one out, all out’ principe voor de classificatie van

¹ Uitleg: “The NORMAN Ecotoxicology Database contains substances listed in the NORMAN substances with their Lowest PNEC [Predicted No Effect Concentration, een waarde die gebruikt kan worden als beschermende norm waaronder er geen directe effecten van blootstelling aan een stof op de ecologie verwacht worden], which were either predicted by QSAR or obtained experimentally. Experimental and predicted Lowest PNECs, which were voted by NORMAN ecotoxicology experts are addressed as ‘verified’. Er zijn momenteel (maart 2021) 1196 stoffen met een ‘verified PNEC’ en 64.447 stoffen met een PNEC die gebaseerd is op een QSAR [een model dat de PNEC voorspelt op basis van stof-kenmerken]. The Lowest PNECs are used primarily for the prioritisation purposes.”



de waterkwaliteit onder de KRW leidt deze analyse van monitoringgegevens van toxische stoffen nog veel vaker dan bij de gebruikelijke stoffen set (zie vorige paragraaf) tot de classificatie van de waterkwaliteit als ‘voldoet niet’ en heel weinig frequent tot een herstel tot het niveau waarbij voor alle stoffen ‘voldoet’ geconstateerd wordt. De hoge gevoeligheid voor achteruitgang (als één van de stoffen boven diens norm is wijzigt de ‘voldoet’-classificatie) en de lage gevoeligheid voor daadwerkelijk herstel (als op één na alle stoffen door maatregelen ‘voldoen’ blijft de klasse ‘voldoet niet’). Deze effecten van het gehanteerde indicatorensysteem (normen + ‘One out, all out’) belemmeren – onbedoeld – het behalen van de KRW-beleidsdoelen. In de praktijk leidt het eerste probleem tot terughoudendheid bij het monitoren van extra stoffen, en het tweede tot het staken van maatregelen die effectief zijn maar niets lijken uit te halen.

1.2.3 Bijstelling geïndiceerd door Europese Commissie

De Europese Commissie heeft in de KRW-*fitness check* onlangs geconstateerd dat de KRW-regelgeving als geheel “*fit for purpose*” is, terwijl er duidelijk geformuleerd werd dat er wel een verbeterde praktijkaanpak nodig is voor chemische verontreinigingen. Dit is geconcludeerd op basis van de rapportage van die *fitness check* (EC 2019).

Belangrijke verbeterpunten die voor verontreinigingen benoemd werden, zijn onder meer het omgaan met opkomende stoffen, het vroeg kunnen onderkennen en voorkómen van stoffen die plots verrassingen voor waterbeheerders opleveren, het eenduidiger kunnen afleiden van en omgaan met effect-gegevens van alle stoffen, en het beoordelen van de mengsels die in de oppervlaktewateren worden aangetroffen.

1.3 De beoordeling van chemische verontreiniging als belemmerende sleutelfactor

Omdat de nadelen uit de “EU-fitness-check” al eerder in de praktijk waren geconstateerd heeft de STOWA heeft in 2015 opdracht gegeven om de verschillende problemen rond de chemische beoordeling aan te pakken, binnen de context van de Ecologische Sleutel Factoren (STOWA 2018). Hieruit is de ecologische sleutel factor toxiciteit (ESFT) afgeleid (Posthuma, De Zwart et al. 2016). De versie uit 2016 wordt verder ESFT1.0 genoemd.

Sinds 2016 is de werkwijze van de ESFT1.0 wereldwijd, en in Nederland, veelvuldig gebruikt. Deze KIWK-notitie beschrijft de geactualiseerde versie, ESFT2.0. De geactualiseerde versie is gemaakt, omdat het veelvuldige gebruik resulteerde in een aantal suggesties voor verbetering, waaronder inhoudelijke verbeterpunten, zoals:

1. Kan de biobeschikbaarheids-correctie verbeterd?
 2. Kunnen er meer stoffen worden beoordeeld?
 3. Kunnen de resultaten beter gekoppeld worden aan de ecologische effecten?
- en technische verbeterpunten, zoals:
4. Kan het rekenmodel gebruiksvriendelijker worden gemaakt?
 5. Kunnen de invoergegevens beter worden gekoppeld aan de invoer-standaarden voor het Informatie Huis Water?

De ESFT, en daarbinnen het Chemie-spoor, sluit exact aan op de vereisten van de KRW. In Bijlage 2 van de KRW wordt immers gesteld dat:



- Over het verzamelen van informatie over drukfactoren:
“De lidstaten verzamelen informatie over soort en omvang van de significante antropogene belastingen waaraan oppervlaktewaterlichamen in elk stroomgebiedsdistrict onderhevig kunnen zijn, en houden die informatie bij”
- En over het beoordelen van effecten:
“De lidstaten beoordelen in hoeverre de oppervlaktewatertoestand van lichamen gevoelig is voor de bovenvermelde vormen van belasting. De lidstaten gebruiken de bovenvermelde informatie die zij verzameld hebben, en alle andere relevante informatie met inbegrip van bestaande milieumonitoringsgegevens, om een beoordeling te maken van de kans dat oppervlaktewaterlichamen in het stroomgebiedsdistrict niet zullen voldoen aan de milieukwaliteitsdoelstellingen die artikel 4 aan die lichamen stelt. De lidstaten kunnen bij die beoordeling modelleringstechnieken gebruiken” (Het Chemie-spoor levert informatie over de kans die hier beschreven wordt)

en verder:

- *“Voor lichamen waarvan is gebleken dat zij gevaar lopen niet te voldoen aan de milieukwaliteitsdoelstellingen moet, voor zover dienstig, een verdere karakterisering plaatsvinden om het ontwerp van de bij artikel 8 voorgeschreven monitoringsprogramma's en de bij artikel 11 voorgeschreven maatregelenprogramma's te optimaliseren.”* Het Chemie-spoor kan worden toegepast met bestaande gegevens, of op basis van specifieke monitoring-gegevens, die bewust verzameld worden vanwege bijvoorbeeld het lokale landgebruik (omdat landgebruik vaak leidt tot emissies van typerende sets van stoffen, die de waterkwaliteit kunnen bedreigen, en dus lokaal onderdeel van deze vorm van aanvullende monitoring zouden moeten zijn).

De KRW vraagt de waterbeheerder dus om, voor een logische set aan stoffen, de kans te bepalen dat een waterlichaam door chemische verontreinigingen de KRW-doelen niet haalt. De omvang van deze kans kan hierbij vertaald worden in het begrip “mengsel toxische druk” van de ESFT. Dat is zo, omdat aangetoond is dat de mengsel toxische druk kwantitatief samenhangt met de mate van effect op aquatische ecosystemen (Posthuma et al., 2020): hoe hoger de toxische druk, hoe meer deze druk het handhaven van- of herstellen naar een goede ecologische toestand belemmert. Daarbij is het belangrijk te onderkennen, dat wetenschappelijk onderzoek heeft aangetoond dat er sprake is van interacties tussen drukfactoren (Lemm et al., 2020), ofwel: chemische stoffen kunnen weliswaar een druk uitoefenen en in principe belemmerd werken, maar dit kan (bijna) onzichtbaar worden door bijvoorbeeld verhoogde beschikbaarheid van nutriënten. Dit compenserende effect van nutriënten kon al verwacht worden vanwege de studie met de veelzeggende titel *“Survival of the fittest...”* (Lassiter and Hallam, 1990) waarin aangetoond werd dat goed gevoede organismen lagere effecten van blootstelling aan toxische stoffen vertonen dan hongerende organismen. Als de nutriënten echter via maatregelen teruggebracht worden naar natuurlijke niveaus, kan de belemmering door toxiciteit alsnog zichtbaar worden (toxiciteit wordt dan “de zwakste schakel” die daadwerkelijk herstel belemmert).

1.4 De basis van de toxische druk berekening

Het Chemie-spoor van de ESFT gebruikt (gemeten, of voorspelde) concentraties van stoffen in water om de toxische druk van die stoffen, van stofgroepen en van mengsels te bepalen. De



afleiding van de mengsel toxische druk is vergelijkbaar met het afleiden van het gezamenlijke ‘aardopwarmingsvermogen’ (“Global Warming Potential”) van de diverse broeikasgassen, of met het bekende “pijpe blazen” bij dronkenschap: de concentraties van allerlei broeikasgassen resp. verschillende soorten dranken leiden tot een geaggregeerde uitkomst voor resp. klimaatverandering of dronkenschap en rijvaardigheid, waarbij de meest bijdragende stoffen het zwaarst gewogen worden. Dat gebeurt ook in het Chemie-spoor, maar nu met ecotoxiciteit van stoffen. Het achterliggende principe is dus eigenlijk: het op basis van relatieve toxiciteit van verschillende stoffen “optellen” (aggregeren) tot een eenheid die weergeeft hoe groot het belemmerende effect van een stof, stofgroep of mengsel is op de ecologie.

Noot: Het andere spoor van de ESFT, het Toxicologie-spoor, gebruikt effect-waarnemingen van totale mengsels om de toxische druk van onbekende mengsels te bepalen, en met de verkregen kennis maatregelen af te leiden. Die waarnemingen worden verzameld door het uitvoeren van bioassays met complete mengsels, zoals die aanwezig zijn in de watersystemen. Het meest bekende voorbeeld van de betekenisvolle toepassing van een dergelijke ‘bioassay’ is ‘de kanarie in de kolenmijn’: als de kanarie die mijnwerkers meenemen in de mijn onwel wordt, is er sprake van mijngassen (van onbekende samenstelling) maar leidt het onwel worden tot nuttige maatregelen (weggaan van de mijnwerkers uit de mijnschacht). Voor het continu bewaken van de waterkwaliteit, van bijvoorbeeld effluenten van industrie of RWZI, worden bijvoorbeeld mossel-monitoren (inclusief een online ICT-verbinding die effecten signaleert) ingezet. In principe kan ook de uitslag van het Toxicologie-spoor uitgedrukt worden als mengsel toxische druk.

1.5 Inhoud van deze KIWK-Notitie

Deze KIWK-Notitie beschrijft de wetenschappelijke achtergronden en de praktische toepassing van het Chemie-spoor van de ESFT2.

De wetenschappelijke basis bestaat uit vier onderdelen die deels verder worden onderbouwd in andere KIWK-Notities:

- De invoerdata
 - o Concentraties van stoffen die waargenomen worden, of waarvan de concentraties voorspeld worden met een milieuchemisch/hydrologisch model
 - o Fysisch-chemische eigenschappen van de te beoordelen watermonsters, omdat een aantal fysisch-chemische eigenschappen bepalend zijn voor de biobeschikbaarheid van de chemische stoffen
- Modellen voor het afleiden van de biologische beschikbaarheid van stoffen (afhankelijk van de fysisch-chemische eigenschappen van het watermonster)
- Modellen voor het afleiden van de toxische druk van een stof, gegeven de biobeschikbare concentratie van die stof
- Modellen voor het afleiden van de toxische druk van groepen stoffen in het mengsel (zoal bijvoorbeeld: de mengsel toxische druk van insecticiden) en van het totale mengsel

De biobeschikbaarheidsmodellen bestaan uit formules die beschrijven welke fractie van de stof beschikbaar is, gegeven de lokale condities. Zo is de beschikbaarheid van metalen bijvoorbeeld sterk afhankelijk van de zuurgraad.



De modellering van de toxische druk van een stof is gebaseerd op het verschijnsel dat de verdeling van de gevoeligheden voor een stof voor een groep geteste soorten een normale verdeling (de bekende klokvormige verdeling) kent, na log-transformatie van de ecotoxiciteitsgegevens (Posthuma et al., 2002). Voor het Chemie-spoor kan gewerkt worden met de rijkdom aan ecotoxiciteitsdata van de wereld, een databestand dat ruim meer dan 250.000 nuttige gegevens bevat (Posthuma et al., 2019a; Posthuma et al., 2019b).

De afleiding van de toxische druk van mengsels gebeurt met een methode die in 2005 gedefinieerd is (De Zwart and Posthuma, 2005), maar erg lijkt om methodieken die in de farmacologie en de humane toxicologie worden gebruikt.

De praktische toepassing van het Chemie-spoor wordt ondersteund door een rekentool, die alle stappen uitvoert, en aan de gebruiker allerlei inzichten geeft, zoals:

1. Welk waterlichaam in een beheergebied heeft de grootste kans dat chemische verontreiniging het behalen van de KRW-doelen belemmert (de hoogste mengsel toxische druk)?
2. Welke stof of stoffen of stofgroepen dragen daar het sterkst aan bij?

Omdat het doel van de toepassing van het Chemie-spoor (en de ESFT als geheel) gericht is op het ondersteunen van het afleiden van (beschermende of curatieve) maatregelen, wordt de ESFT-uitvoer zo veel mogelijk gericht *op het opleveren van een goede diagnose van de bedreigingen door chemische verontreinigingen.*



2 Wetenschappelijke basis van het Chemie-spoor

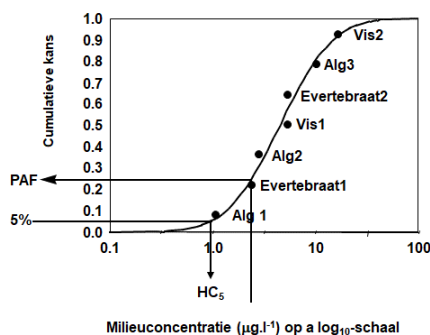
2.1 Historie en beginselen

De wetenschappelijke basis voor het Chemie-spoor is in het midden van de jaren '80 van de vorige eeuw gelegd, bijna tegelijkertijd en waarschijnlijk onafhankelijk van elkaar in resp. de VS en Nederland (Stephan, Mount et al. 1985, Kooijman 1987, Van Straalen and Denneman 1989).

In de tachtiger jaren van de vorige eeuw waren er grote zorgen over de toxiciteit van stoffen in het milieu, en waren er ook al veel waarnemingen gedaan aan de ecotoxiciteit van stoffen bij verschillende soorten die onder laboratorium-condities werden getoetst. De ecotoxiciteit van stoffen wordt namelijk vaak aan de hand van laboratoriumtesten vastgelegd in test-eindpunten zoals de NOEC of de EC50 (No Observed Effect Concentration, of Effect Concentration met 50% effect). Net als dat de verdeling van de lengtes van mensen in een gezelschap vaak normaal verdeeld is – de zeer bekende klokvormige verdeling – werd opgemerkt dat ook de verdeling van gevoeligheden voor een stof tussen soorten die getest waren zo'n klokvormige verdeling volgden (Stephan, Mount et al. 1985, Suter 2002). De klokvormige (statistische) verdeling heeft historisch gezien ook een allesbepalende rol gespeeld bij het ontwikkelen van de beoordelingen van allerlei vormen van kansen en risico's door de mens (zie de historische analyse van de achtergronden van het risico-denken door de mens van Bernstein (1996), waar het nut van de normale verdeling voor risicobeoordelingen door de vroegste statistici al onderkend en gebruikt werd).

2.2 Conceptuele aansluiting tussen normstelling en toxische druk

De historisch begrijpelijke en simpele waarneming over de klokvormige verdeling van gevoeligheden van soorten heeft geleid tot het ontwerpen van de basisbeginselen van het Chemie-spoor van de ESFT. Die beginselen, en de twee praktijktoepassingen, zijn samengevat in Figuur 1. De beginselen betekenen dat de normstelling conceptueel op dezelfde modellen is gebaseerd is als de bepaling van de toxische druk van een stof.



Figuur 1. De wetenschappelijke basis van het Chemie-spoor is de waarneming dat de gevoeligheden van soorten die blootgesteld worden aan een stof een klokvormige verdeling hebben”, die in de cumulatieve vorm een S-curve vormt. De figuur toont ook het beleidsmatig belangrijke tweeledige gebruik: bij een beleidsmatig gekozen Y-waarde (het risiconiveau), uitgedrukt als “PAF” (potentieel aangetaste fractie van soorten) kan voor elke stof de stof-



specifieke HC5 afgeleid worden (dit is de basis voor de normstelling). Omgekeerd kan bij een bekende milieuconcentratie (X) de PAF afgeleid worden (“hoe erg is de waargenomen verontreiniging? Welke fractie soorten wordt aangetast?”).

2.3 Aantal stoffen met ecotoxiciteitsgegevens

De eerste stap voor het bepalen van de toxische druk van een watermonster is – op de achtergrond – door onderzoekers gemaakt, door het verzamelen van ecotoxiciteitsdata voor zo veel mogelijk soorten. Hiervoor zijn zeer uitgebreide databestanden beschikbaar, met meer dan een miljoen testgegevens, wereldwijd. In dergelijke grote databestanden zitten dubbele waarnemingen, en waarnemingen die geen betekenis hebben voor natuurlijke systemen. Daarom is er een grote data-curatie-stap uitgevoerd, en hebben we nu de beschikking over meer dan 250.000 relevante ecotoxiciteitsgegevens (Posthuma, van Gils et al. 2019), veel meer dan beschikbaar waren voor de ESFT1 (Posthuma et al., 2016). De tweede stap bestaat uit het afleiden van de klokvormige verdeling van de gevoeligheden voor de soorten die getoetst zijn, per stof (de normale verdeling uit de statistiek). Die heeft vaak de vorm van een sigmoïde curve, als de beschikbare gegevens cumulatief worden als grafiek worden getekend. De derde stap bestaat uit het nuttige gebruiken van deze curve. De curve wordt in het Engels een *Species Sensitivity Distribution (SSD)* genoemd. Onlangs zijn er SSDs gepubliceerd voor 12.386 stoffen (Posthuma, van Gils et al. 2019), gebaseerd op de gecureerde dataset van meer dan 250.000 ecotoxiciteitsdata. De ESFT2 maakt dus – als het gaat om ecotoxiciteitsgegevens – toxische-druk berekeningen mogelijk voor 12.386 stoffen.

In de praktijk worden de ecotoxiciteitsdata eerst log-getransformeerd om de klokvormige curve te krijgen. Ofwel: een SSD wordt vaak beschreven als een log-normale verdeling van de ecotoxiciteitsdata die voor een stof en verschillende soorten beschikbaar zijn. Het belangrijkste feit is, dat de SSDs van stoffen verschillend zijn:

- Zeer toxische stoffen hebben een log-normale verdeling die heel erg naar links in de figuur ligt, en
- Weinig toxische stoffen hebben SSDs die verder naar rechts liggen.

De X-as geeft de concentratie van een stof in het milieu, en de Y-as geeft de fractie van de geteste soorten die aangetast zou zijn bij die concentratie. De Y-as kan dus afgelezen worden als een dimensie-loze, relatieve maatlat voor de voorspelde mate van effecten op de biodiversiteit. De Y-as wordt uitgedrukt als de fractie soorten die bij een gegeven blootstellingsniveau wordt aangetast, en heeft daardoor een ‘maatlat-lengte’ van 0 – 1 (als fractie) of 0 – 100 (als de gebruiker spreekt van percentage aangetaste soorten). De eenheid op de Y-as is PAF (Potentieel Aangetaste Fractie). Omdat de Y-as ook uitgedrukt wordt als de kans op effecten op een willekeurige soort (PES², *Probability of Effects on a Species*) is het SSD-model dus direct van toepassing bij KRW-Bijlage II (zoals in de Inleiding geciteerd).

² Conceptueel zijn PAF en PES dus identiek. Beide drukken een kans op effecten uit, waarbij dit bij de PES letterlijk is (Probability of Effects on a randomly selected Species), en waarbij dit een biodiversiteits-interpretatie gekregen heeft bij de PAF. Uitleg aan de hand van een voorbeeld: als de PES bijvoorbeeld 0,45 is, is er 45% kans dat een willekeurige soort wordt aangetast bij blootstelling X, terwijl het tegelijk zo is dat een honderdvoudige herhaling hiervan suggereert dat 45% van de soorten zou zijn aangetast.

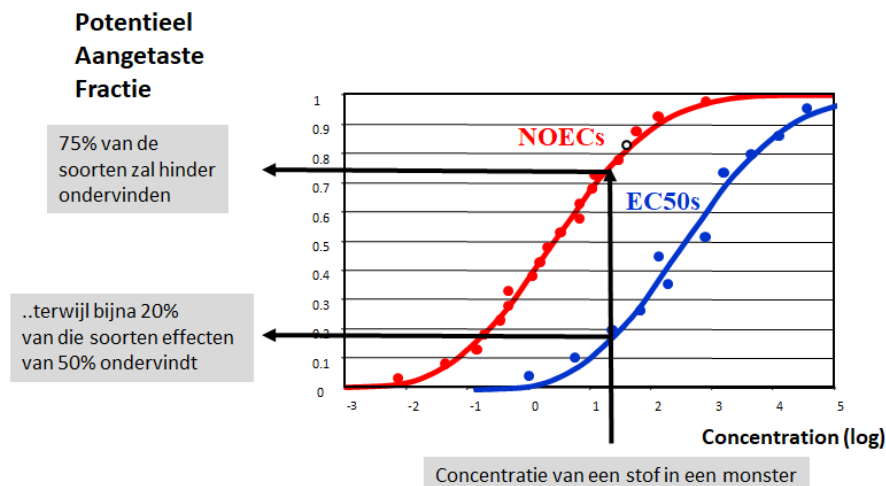


2.4 Twee soorten toxische druk per stof

De soortengevoeligheidsverdelingen die afgeleid zijn in Posthuma et al. (2019b) en die gebruikt worden in de ESFT2 hebben twee verschijningsvormen, *om zo goed mogelijk aan te sluiten bij de KRW*.

Er zijn namelijk nieuwe SSDs afgeleid die aansluiten bij de beschermdoelstellingen van de KRW en dus de normstelling voor stoffen, en er zijn SSDs afgeleid die aansluiten bij de classificatie van ecologische effecten van de KRW, en dus bij de ecologische toestand. De laatste SSDs zijn qua afleiding bijna gelijk aan de ESFT1, de eerste SSDs zijn een nuttige en nieuw ontwikkelde aanpak.

De beide SSDs zijn in de praktijk afgeleid door enerzijds van de stoffen de SSD-NOEC af te leiden (het sigmoïde model dat afgeleid wordt van de beschikbare concentratieniveaus waarop er nog net geen effect is, de NOECs) en anderzijds de SSD-EC50 af te leiden (het sigmoïde model dat afgeleid wordt van concentratieniveaus die 50% effect opleveren voor eindpunten zoals groei en reproductie). De relatie tussen beide figuren wordt getoond in Figuur 2. Bij één gemeten milieuconcentratie kan dus een vrij grote fractie soorten gehinderd zijn (blootstelling boven hun geen-effect niveau), terwijl (logischerwijs) een veel kleinere fractie grote effecten (50% of meer) ondervindt.

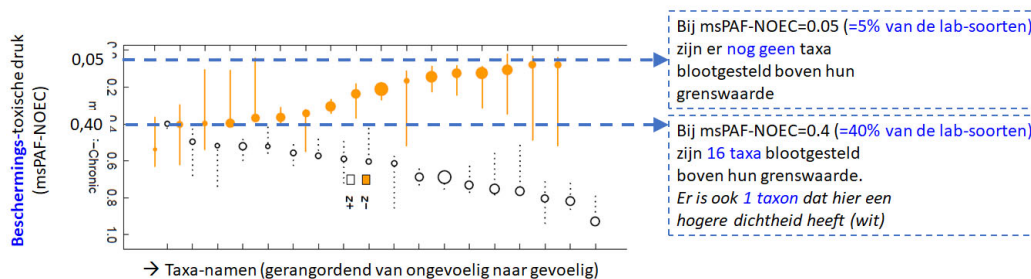


Figuur 2. Van elke stof kan een SSD-NOEC en een SSD-EC50 worden afgeleid, om de klokvormige verdeling van geen-effect concentraties resp. 50%-effect concentraties voor die stof te beschrijven. De SSD-NOEC (rood) ligt links van de SSD-EC50 (blauw) van die stof. Als er een milieuverontreiniging geconstateerd wordt, kan afgelezen worden wat de PAF-NOEC resp. de PAF-EC50 is, als fractie soorten die blootgesteld wordt boven het geen-effect niveau resp. boven het 50%-effect niveau. De linkse SSD is nauw gerelateerd aan de normstelling, de rechtse SSD blijkt gerelateerd te zijn aan soortenverlies. Beide vormen van SSD-gebruik zijn belangrijk voor de KRW, voor resp. beoordeling van bescherming en beoordeling van aantasting van de ecologische toestand.



2.5 Basale validiteit: SSD-NOECs en het KRW-beschermdoel

In de praktijk wordt voor de normstelling vaak gewerkt met een SSD-NOEC, en wordt de kritische concentratiegrens afgeleid van een Y-waarde (PAF-NOEC = 0.05). Deze waarde staat bekend als het ‘95%-beschermingsniveau’, omdat bij deze kritische concentratiegrens immers 95% van de soorten blootgesteld is *onder* hun NOEC (hun geen-effect grens). In de eerdergenoemde historie van het SSD-model en de normstelling is als operationele werkwijze gedefinieerd dat er een beleidsmatig beschermdoel gedefinieerd wordt (volledige bescherming van structuur en functie van ecosystemen), waarvoor een operationalisatie nodig was. Die werd gevonden door aan te nemen, dat die volledige bescherming waarschijnlijk zou bestaan tot aan een concentratie die gelijk was aan de PAF-NOEC=0,05, oftewel: het 95%-beschermingscriterium. Uit KIWK-Tox onderzoek is onlangs gebleken, dat deze aanname voor Nederlandse watersystemen stand houdt voor mengsels: bij de msPAF-NOEC < 0,05 zijn er in een studie geen dichtheidseffecten gevonden bij afzonderlijke aquatische evertebraten-taxa (KIWK-Notitie I-2). Dit is weergegeven in Figuur 3. De figuur illustreert dat mengsels in Nederlandse oppervlaktewatersystemen eigenlijk geen of nauwelijks effecten op de dichtheden van evertebraten-taxa hebben bij de in de normstelling gehanteerde blootstellingsgrenswaarde van PAF-NOEC=msPAF-NOEC=0,05. Bij toenemende blootstelling kan worden afgelezen dat steeds meer taxa boven hun geen-effect grens worden blootgesteld. Een graduele toename van de toxische druk betekent een graduele toename van de fractie soorten die effecten ondervindt, terwijl de soorten die boven hun geen-effectgrens worden blootgesteld steeds grotere effecten ondervindt naarmate de blootstelling hoger wordt.



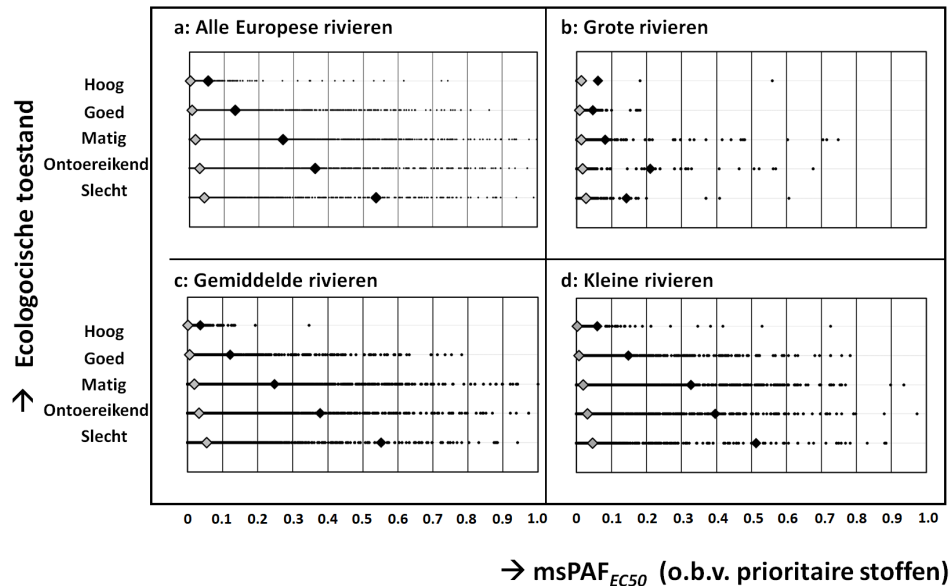
Figuur 3. Vergelijking tussen de toxische druk die samenhangt met het beschermingsdoel van de KRW (operationeel gedefinieerd als PAF-NOEC=msPAF-NOEC=0,05) en het optreden van effecten bij aquatische evertebraten-taxa. De oranje bolletjes geven de mengsel-toxische druk waarde aan waarbij een taxon (elk bolletje is een taxon) in dichtheid vermindert. De meest gevoelige soort toont dus voor het eerst een dichtheids-effect dat toegeschreven wordt aan mengsels bij msPAF-NOEC=0,05. De witte bolletjes duiden op taxa die door indirecte effecten in dichtheid toenemen (bv. als de predator verdwijnt door toxiciteit kan de prooidichtheid door een indirect effect toenemen).

2.6 Basale interpretatie: SSD-EC50s en soortenverlies

Wanneer de potentieel aangetaste fractie wordt afgeleid van EC50-gegevens (de SSD-EC50) dan zal het duidelijk zijn dat er dan sprake is van forse effecten die in het veld verwacht mogen worden. Daarom werd er ook verwacht, dat de PAF-EC50 een relatie zou vertonen met de ecologische toestand; bij verslechterende ecologische toestand is er immers sprake van een toenemend verlies aan soorten, volgens de KRW-definitie. Door de voorspelde toxische



druk (msPAF-EC50) te vergelijken met de ecologische toestand werd een heel duidelijk resultaat verkregen: een graduele verhoging van de toxische druk in een serie waterlichamen (msPAF-EC50) co-varieert met een gradueel sterkere afwijking van de goede ecologische toestand (Figuur 4).



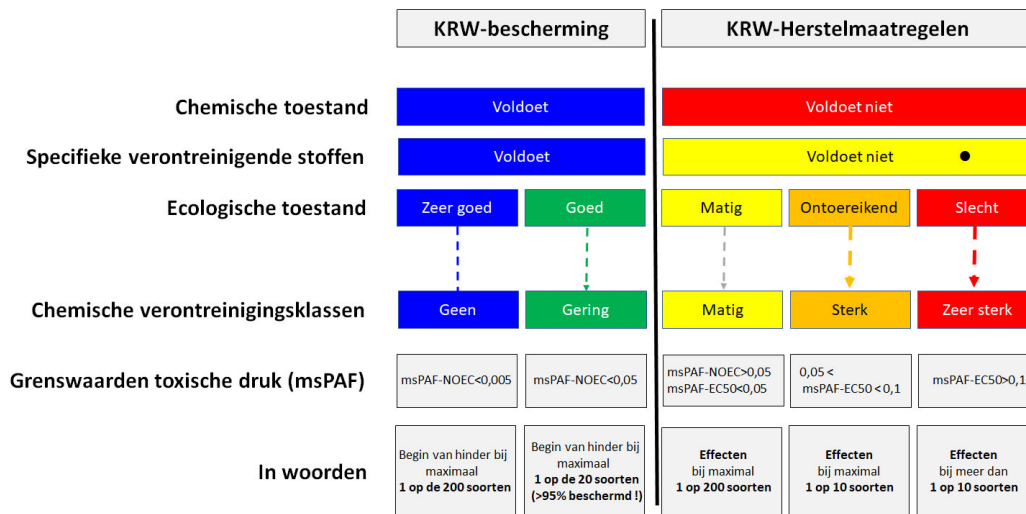
Figuur 4. De relatie tussen mengsel-toxische druk uitgedrukt als msPAF-EC50 en de ecologische toestand. De grijze en zwarte tekens geven de 50 en 95 kwantielen aan van de gevonden toxische-druk waarden per ecologische toestandsklasse. Een verhoogde toxische druk gaat niet samen met een hoge of goede ecologische toestand, en gradueel stijgende toxische druk betekent een gradueel sterker wordende belemmering om de hoge of goede toestand te handhaven of te bereiken. Er is grote variatie doordat ook andere drukfactoren de ecologische toestand bepalen. Die kan “slecht” zijn door bijvoorbeeld nutriënten, zelfs als de toxische druk (X) bijna nihil is.

2.7 Samenvattende interpretatie voor praktijktoepassingen

In ESFT2.0 wordt dus, als de milieuconcentratie van een stof ingevoerd wordt, uitgerekend wat de PAF-NOEC en de PAF-EC50 bij die concentratie is. In beide gevallen duidt een toenemende PAF-waarde op toenemende kans op effecten, in het ene geval uitgedrukt als een toenemende fractie soorten die aangetast zou zijn boven hun geen-effectniveau (SSD-NOEC) – maar waarvan we nog weten of ze dan verdwijnen – of boven een midden-effectniveau van 50% op een vitaal kenmerk, zoals groei en reproductie (EC50) – waarbij we weten dat er dan soorten verdwijnen. De rekentool van het Chemie-spoor levert als uitvoer beide schattingswaarden, dus een PAF-NOEC en een PAF-EC50 waarde per monster per stof.

Beide resultaten kunnen worden verenigd in een eenvoudig interpretatieschema, dat aansluit op de ecologische toestandsklassen. De onderbouwing wordt uiteengezet in KIWK-Notitie I3”. Voor de volledigheid van de huidige KIWK-Notitie wordt de classificatie uit I3-Notitie hier nogmaals getoond (Figuur 5).





Figuur 5. De classificatie van (mengsel) toxische druk resultaten, aangesloten op de ecologische toestandsklassen van de KRW zie Posthuma et al. (2021a)).

Noot: de grenswaarden uit de ESFT1.0 bestonden uitsluitend uit msPAF-EC50 eenheden, binnen de drie-klassensystematiek van de ESF-systematiek: $msPAF-EC50 < 0,05$ definieert ESFT1-groen; $0,05 < msPAF-EC50 < 0,1$ definieert ESFT1-geel; en $msPAF > 0,1$ definieert ESFT1-rood.

2.8 Van concentratie naar interpretatie

Het theoretische overzicht dat hierboven beschreven is, toont dus dat waterbeheerders:

- geheel volgens de wetsteksten, doelen en beginselen van de KRW
- gebruik kunnen maken van concentratiegegevens van stoffen (voorspeld of gemeten)
 - o prioritaire stoffen
 - o specifieke stoffen voor Nederland
 - o specifieke stoffen die bij de lokale vormen van landgebruik en economische activiteiten verwacht mogen worden
- door de concentratiegegevens te combineren met gegevens over ecotoxiciteit, in de vorm van:
 - o SSD-NOEC modellen
 - o SSD-EC50 modellen



- waardoor ze – rekening houdend met lokale condities waardoor stoffen minder beschikbaar kunnen zijn – de toxische druk van elke stof per monster kunnen bepalen (in de vorm van PAF-NOEC en PAF-EC50)
- gevolgd door het afleiden van de mengsel-toxische druk voor stofgroepen, en voor het totale mengsel in een monster (in de vorm van msPAF-NOEC en msPAF-EC50),
- en uiteindelijk gevolgd door een samenvatting in vijf klassen, die gerelateerd zijn aan de KRW-ecologische toestandsklassen

De samengevatte eindresultaten (klassen van de ernst van de invloeden van chemische verontreiniging) zijn direct bruikbaar voor het prioriteren van maatregelen. De eindresultaten vormen een betekenisvolle aanvulling op de gebruikelijke KRW-normtoetsing, door die:

- (a) te nuanceren (van voldoet/voldoet niet → graduele inzicht in ernst van de effecten)
- (b) uit te breiden naar mengsels
- (c) uit te breiden naar (potentieel) maximaal 12.368 stoffen.



3 Stappenplan voor het bepalen van de toxische druk

3.1 Motivatie voor (ook) een stappenplan

De samengevatte theorie (uit het vorige hoofdstuk) kan verder uitgewerkt worden als stappenplan. Dat is voor de praktijk van de waterbeheerders vaak van belang, omdat de uitleg van de werkwijzen en achtergronden van afzonderlijk uitgelegde stappen behulpzaam is bij het uitvoeren van beoordelingen en het interpreteren van resultaten. Het uitvoeren van beoordelingen kan namelijk bijvoorbeeld moeilijk zijn door allerlei praktijkzaken. Zo zijn in het verleden monitoring-gegevens van metalen bijvoorbeeld samengevat als totaalconcentraties en als gefilterde concentraties. Uiteraard zou de ESFT1 en de ESFT2 alleen gebruik maken van de laatste gegevens, en zeker niet beide uitrekenen en daarna een ‘mengsel-toxische druk’ berekenen. Alleen door de stappen goed te voorzien kunnen waterbeheerders dit soort fouten voorkómen. De rekentool moet goed gebruikt kunnen worden, door elke stap te specificeren. Noot: er is een Protocol in voorbereiding, waarmee expert-gebruikers onlangs de kartering van de toxische druk van geheel Nederland hebben afgeleid. In dat Protocol staan alle stappen en ‘valkuilen’ die blijken te bestaan als we werken met gewone monitoring-data. Het stappenplan hieronder is te zien als samenvattend overzicht van dat Protocol.

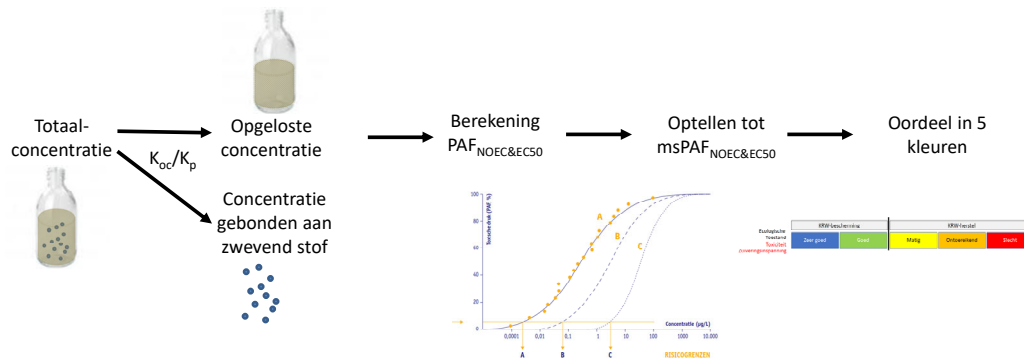
3.2 Overzicht van de stappen

Het bepalen van de toxische druk verloopt via een aantal stappen, zoals samengevat in Figuur 6. Belangrijk is, dat versie 2 van de ESF-Toxiciteit uitgebreid en vernieuwd is ten opzichte van versie 1 op de volgende hoofdpunten:

1. Het afleiden van de chronische toxische druk als numerieke waarde tussen 0 en 1 (PAF en msPAF-NOEC maatlat van 0 – 1) op basis van de biobeschikbare concentratie,
2. Het afleiden van de acute toxische druk als (ook) numerieke waarde tussen 0 en 1 (PAF en msPAF-EC50 maatlat van 0 – 1) op basis van de biobeschikbare concentratie,
3. Het kunnen samenvatten van beide in een classificatie die gekalibreerd is op de vijf ecologische toestandsklassen, zodat:
4. De waterbeheerder kan vaststellen of er voor de beoordeelde stoffen, stofgroepen en totale mengsels sprake is van afdoende bescherming – met als handelingsperspectief: het instandhouden van deze bescherming – of er voor de beoordeelde stoffen, stofgroepen en totale mengsels sprake is van concentraties die effecten op de ecologische toestand veroorzaken – met als handelingsperspectief: het nemen van maatregelen die de ecologische toestand herstelt tot (tenminste) goed.

Naast deze hoofdpunten is er nog een veelheid aan uitbreidingen en verbeteringen doorgevoerd, zoals over biobeschikbaarheid, specifieke stoffen, mengsel-berekeningen, technische keuzes, enz.





Figuur 6. Stappenplan voor het bepalen van de toxische druk van een watermonster, vanaf de keuze van de stoffen die gemonitord worden tot en met de interpretatie.

3.3 Representatieve verzameling van stoffen

Het doel van het bepalen van de toxische druk van stoffen, stofgroepen en totale mengsels is het verkrijgen van inzicht in de variatie in de Status van (vaak) een hydrologisch geheel van waterlichamen wat betreft de mate van belemmering van de ecologische toestand en de verhoging van de zuiveringsinspanning door chemische verontreiniging. Dit doel vraagt om concentratiemetingen (of voorspelde concentraties) van *alle stoffen die in de lokale mengsels van de waterlichamen bijdragen aan de beide typen effect*. Hoe komt een waterbeheerder in de praktijk tot een representatieve verzameling concentratiegegevens van stoffen? En hoe kan beoordeeld worden of de meetgegevens die er (toevallig) zijn afdoende representatief zijn voor de lokale chemische verontreiniging?

De samenstelling van de lokale mengsels kan beredeneerd worden door de volgende overwegingen:

1. Op EU-niveau is een aantal stoffen benoemd – de prioritaire stoffen – die EU-breed vóórkomen, en daarom vaak deel uitmaken van het lokale stoffenpakket, of gecheckt worden op hun aan- of afwezigheid
2. Op het schaalniveau van de stroomgebieden is een aantal stoffen benoemd – de op Nederlandse schaal specifieke stoffen, voor de stroomgebieden van de Rijn, Maas, Schelde en Eems, en daarom vaak deel uitmaken van het lokale stoffenpakket
3. Op de hydrologisch lagere schaalniveaus kan een aantal stoffen benoemd worden die voor die schaal relevant zijn, door gebruikmaking van de ESFT2-opzoektafel (zie KIWK-Tox product S) waarin een relatie gelegd wordt tussen de economische activiteiten en de stoffen die daarbij vaak gebruikt en dus ook geëmitteerd kunnen worden.
4. Het overnemen van gegevens van stoffenlijsten die bovenstrooms als belangrijk zijn aangemerkt, en die via hydrologische verbindingen in een lokaal waterlichaam terecht kunnen komen (in sommige gevallen kan deze vierde categorie stoffen zelfs vrijwel de enige bron van chemische verontreinigingen zijn)

De voor een waterlichaam verzameling van relevante stoffen bestaat uit de doorsnede van deze vier verzamelingen stoffen. Deze stoffen zouden moeten worden gemeten (of via modellering voorspeld voor scenario-analyses), om daaruit een toxische druk van stoffen,



stofgroepen en mengsels af te leiden die representatief is voor dat waterlichaam. Naast deze theoretische overwegingen zijn er nog aanvullende overwegingen. De ene overweging is, dat de werkgroep ‘opkomende stoffen’ een systematische analyse uitvoert om stoffen die een bedreiging vormen voor de doelen van de KRW te identificeren; dit kan een uitbreiding opleveren van de opsomming van stoffen (als in de praktijk stoffen in het milieu gevonden worden die niet uit de punten 1, 2 en 3 gevolgd zijn) maar ook een beperking zijn (als stoffen wel gebruikt, maar weinig geëmitteerd worden, of snel afgebroken worden, of anderszins minder bedreigend blijken te zijn).

De bovenstaande redeneringen leveren een complete, representatieve stoffenlijst die naar beste kunnen is afgeleid. Het is echter tegelijkertijd zo, dat er in wetenschappelijk onderzoek is gevonden, dat de mengsel-toxiciteit in een waterlichaam vaak gedomineerd wordt door enkele stoffen, waaruit volgt dat het monitoren van juist die stoffen cruciaal is om een representatieve mengsel-toxische druk af te leiden. Het niet-voorhanden hebben van gegevens over een groot aantal stoffen hoeft dus niet te betekenen dat de toxische druk niet behoorlijk goed kan worden ingeschat. Dit effect staat bekend onder de naam ‘Pareto-verdeling’, beter bekend als de 80-20 regel. Directe toepassing van deze regel zou betekenen, dat 80% van de toxische effecten van mengsels verklaard worden door 20% van de stoffen. In de praktijk blijkt dat de verdeling schever is, en kan lijken op een 90-10 of zelfs 95-5 of 99-1 verdeling (Vallotton and Price, 2016; van de Meent et al., 2020). Dit verschijnsel is dus belangrijk omdat het de monitoring vereenvoudigt: niet alle stoffen uit de vier lijsten zijn even belangrijk, en zouden gemeten hoeven te worden (anders gezegd: een stof die 1% bijdraagt hoeft niet bovenaan de prioriteitenlijst voor monitoring te staan). Maar de regel is tegelijkertijd complex, omdat niet *a priori* bekend is welke stoffen tot de ‘dirty dozen’ behoren. Voor de praktijk is een scherpe, analytische redenering hier vaak behulpzaam, naast het werken van ‘breed naar smal’ (eerste meetronde breder meten, in latere rondes de aandacht richten op lokale ‘dirty dozen’).

Het resultaat van deze stap is een stoffenlijst en een karakterisering van de inschatting van de representativiteit; onzekerheden (zoals stoffen die wel geëmitteerd worden, maar niet (kunnen) worden gemeten) worden genoteerd voor de interpretatie-stap.

3.4 *Verzamelen van monitoringdata of voorspelde concentraties*

Na het identificeren van een representatieve stoffenlijst worden monitoringdata verzameld. Die bestaan uit meta-informatie (zoals plaats en tijd van monitoring), fysisch-chemische informatie over de parameters van de waterkwaliteit die de biobeschikbaarheid van stoffen bepalen, en stofnamen, -concentraties en -hoedanigheden. Hoedanigheden van stoffen zijn, bijvoorbeeld, totaal- of gefilterde concentraties. Het resultaat van deze stap is een set van monitoringdata van chemische verontreinigingen (plaats, tijd, stofidentificatie, concentratie, hoedanigheid) geschikt voor een watersysteem-analyse. De rekentool van het Chemie-spoor in de ESFT2 is opgezet met het oogmerk om de monitoringdata ‘in te lezen’ vanuit de dataformats van het Informatiehuis Water (IHW).

3.5 *Biologische beschikbaarheid*

De fysisch-chemische kenmerken van een waterlichaam zijn bepalend voor de mate waarin stoffen beschikbaar zijn. De zuurgraad bepaalt bijvoorbeeld sterk de mate waarin metalen beschikbaar zijn voor blootstelling.



Bij de berekening van de toxische druk worden empirische formules gebruikt, die gebaseerd zijn op zeer uitgebreide datasets van watermetingen. Uit die datasets zijn formules afgeleid waarmee de biobeschikbare fractie van stoffen in andere data sets kan worden berekend.

Op dit moment zijn de formules voor metalen identiek aan de formules van de ESFT1 uit 2016. Vanwege de herbouw van de chemietool zijn de nieuwe formules voor metalen (binding aan EDTA) nog niet opgenomen.

De formules voor organische stoffen zijn ook identiek aan de formules van de ESFT1 uit 2016, maar de bij de berekeningen benodigde Koc-waarden van de stoffen worden geactualiseerd. Dat betekent ook dat, na afronding van het maken en doorvoeren van die gegevens in de stoffenlijst en de rekentool, het aantal stoffen waarvoor de biobeschikbare fractie kan worden afgeleid wordt in de ESFT2 toeneemt.

Het resultaat van deze stap is een set van biobeschikbare concentraties van chemische verontreinigingen (plaats, tijd, stofidentificatie, concentratie, hoedanigheid) geschikt voor een watersysteem-analyse.

3.6 Onderscheid natuurlijke en synthetische stoffen

De KRW maakt systematisch onderscheid tussen natuurlijke en synthetische stoffen. Synthetische stoffen komen niet van nature voor, en de toxische druk is dus voor alle waterlichamen zonder humane invloeden nihil. Natuurlijke stoffen komen in de natuur voor, en het belang daarvan is dat verschillende locaties van nature verschillende achtergrondconcentraties hebben. Het kan dus van nature zo zijn, dat een waterlichaam een verhoogde concentratie van zo'n stof kent, die in principe een toxische druk vertegenwoordigt: de lokale concentratie heeft effecten op de generieke soortenverzameling, die gebruikt wordt om de SSD af te leiden.

Voor de interpretatie onder de KRW moet hier iets specifiek afdgewogen worden, namelijk: dat zo'n natuurlijke verhoogde concentratie voor de *lokale soortenverzameling* **geen druk** oplevert: die lokale soorten zijn immers geadapteerd aan die lokale natuurlijke concentraties, en de waterbeheerder moet hierdoor bij de interpretatie rekening mee houden. Voor die situaties (met alleen natuurlijk verhoogde achtergrondconcentraties) is het voor een waterbeheerder *niet logisch om te concluderen dat daar maatregelen nodig zijn*.

Door aanvullend onderzoek kan hier (aanvullend op de ESFT2, voor natuurlijke stoffen) een correctie-methodiek worden ontwikkeld, waardoor de natuurlijke achtergrondconcentraties ook bij berekeningen geen verhoogde toxische druk opleveren. Hiervoor moet de bestaande kennis over natuurlijke achtergrondconcentraties, en over de betekenis ervan voor de risicobeoordeling, operationeel gemaakt worden. Dit is voor een aantal natuurlijk voorkomende stoffen waarschijnlijk relatief goed mogelijk, maar niet voor alle natuurlijk voorkomende stoffen (gebrek aan natuurlijke achtergrondgegevens).

3.7 Toxische druk per stof

De toxische druk per stof wordt afgeleid op basis van biobeschikbare concentraties en de ecotoxiciteitsdata van een generieke verzameling soorten, via de SSD-NOEC en de SSD-



EC50 (zie Figuur 2). De ESFT2-rekentool berekent hierbij voor elk monster dus twee uitkomsten per stof:

- De PAF-NOEC
- De PAF-EC50

Beide worden uitgedrukt op een 0-1 schaal, en ze drukken resp. uit:

- De fractie soorten die onvoldoende beschermd wordt, waarbij een PAF-NOEC=0,05 als grenswaarde gerelateerd is aan normstellingsconcepten
- De fractie soorten die fikse effecten zal ondervinden op eindpunten zoals groei en reproductie (namelijk: op het 50%-effect niveau)

De verkregen resultaten kunnen op allerlei manieren verder worden verwerkt door de waterbeheerders, zoals in een kaartbeeld van de toxische druk verschillen per stof tussen waterlichamen, of een analyse van een trend in de tijd. De verkregen resultaten kunnen, door de toepassing van de criteria voor het indelen in chemische effectklassen (vijf kleuren), eenvoudig worden samengevat voor kartering. In een watersysteemanalyse levert dit (dus) een beeld op van een watersysteem waar op verschillende locaties een verschillende toxische druk van elke stof kan bestaan.

Noot: de berekende toxische druk is de best beschikbare schatter voor de toxiciteit van de stofgegevens die gemeten en daarna ingevoerd zijn. Die schatter kan berekend worden door metingen die bijna gelijk zijn aan de rapportagegrens van de meetmethode. Het is logisch, dat bij de interpretatie rekening wordt gehouden met problemen zoals met detectielimieten. De interpretatie van een sterke gradiënt, met duidelijk gemeten verhoogde concentraties en toxische druk en (veel) lagere waarden, zal eenduidig geïnterpreteerd kunnen worden als prioritering van maatregelen naar de locaties met de duidelijk verhoogde toxiciteit. Als er echter tien waterlichamen worden vergeleken met concentraties dichtbij de rapportagegrens is de rangorde van toxiciteit dus (eigenlijk) onzeker, en kan de rekentool het meetprobleem niet oplossen en toch komen met een rangorde voor prioritering van maatregelen. Anders gezegd: de beoordelaar moet met gezond verstand de relatieve verschillen, in ruimte en/of tijd, tussen monsters interpreteren, met als oogmerk het afleiden van prioriteiten in maatregelen.

3.8 Toxische druk per stofgroep

De rekentool maakt het mogelijk om de interpretatie op een hoger aggregatieniveau te brengen, door naar de druk van stofgroepen te kijken, of naar de totale toxische druk. In deze paragraaf kijken we eerst naar de toxische druk van stofgroepen.

Ervaringen met de analyses van zeer grote datasets hebben geleid tot het inzicht, dat waterbeheerders de analyses van toxische druk gegevens het beste kunnen gebruiken voor het afleiden en prioriteren van maatregelen, als ze de toxische druk presenteren en samenvatten voor stofgroepen. Hierbij zijn twee mogelijkheden:

- Samenvoegen van stoffen in groepen, vanwege chemische verwantschap (alle metalen bij elkaar, alle PAKs bij elkaar, etc.)
- Samenvoegen van stoffen met een gelijk werkingsmechanisme, bijvoorbeeld alle hormoon verstorende stoffen.
- Samenvoegen van stoffen in groepen, vanwege gemeenschappelijke emissiebronnen (alle RWZI-stoffen bij elkaar, alle landbouwchemicaliën bij elkaar, etc.).



Al deze indelingsmogelijkheden leveren, met behulp van de rekentool, inzicht in, respectievelijk:

- de netto bedreiging door chemisch of toxicologisch verwante stofgroepen, waarbij bijvoorbeeld bestrijdingsmiddelen in een gebied bedreigender kunnen zijn dan medicijnresten – zodat de waterbeheerder kan concluderen dat de aandacht in monitoring en maatregelen voor een gebied sterker gericht moet zijn op bepaalde stofgroepen,
- de netto bedreiging door een emissiebron, waarbij bijvoorbeeld RWZI-emissies in een gebied bedreigender zijn dan landbouwchemicaliën (zoals dicht bij een stad) – zodat de waterbeheerder kan concluderen dat de aandacht in monitoring en maatregelen voor een gebied sterker gericht moet zijn op de dominante emissiebron van meerdere stoffen.

De mengsel-toxische druk van de stofgroepen kan in afzonderlijke kaarten ruimtelijk worden gepresenteerd. Onlangs is dat gedaan voor Europa, en voor Nederland. Enkele impressies staan in Hoofdstuk 4.

Het wordt aan de waterbeheerder geadviseerd om de aandacht vooral te richten op stofgroepen, en de interpretatie van de gegevens van de berekeningen op dit niveau. Dat advies wordt gegeven, omdat dit enerzijds voorkomt dat er 100 kaarten moeten worden geïnterpreteerd als er 100 stoffen worden gemeten; het samenvatten geeft meer inzicht. Bijvoorbeeld, in ‘waterbed-effecten’, waarbij de ene stof door maatregelen teruggedrongen wordt terwijl een andere stof – met dezelfde functie – als vervanger net zo toxisch is. Anderzijds wordt het advies gegeven, omdat de samenvatting per stofgroep niet zo gevoelig (of: anders gevoelig) is voor wisselende stoffenpakketten, wat nu eenmaal een praktijkgegeven is. Als de mengsel-toxische druk voor PAKs en voor bestrijdingsmiddelen apart wordt gepresenteerd per stofgroep, dan zal duidelijk zijn dat de PAK-metingen vaak dezelfde set PAKs betreffen (zodat de stofgroep-analyse bijna ideaal is), en dat de bestrijdingsmiddelen-metingen vaak wisselen van aantal en aard van de stoffen. Het apart houden van PAKs en bestrijdingsmiddelen levert een duidelijk voordeel, voor de duidelijke uitkomsten voor de PAKs. De analyse van gegevens over de mengsel toxische druk van het totale mengsel van PAKs en bestrijdingsmiddelen zal onduidelijker zijn, voor zowel PAKs als de bestrijdingsmiddelen, als beide stofgroepen bij elkaar worden genomen.

De verkregen resultaten kunnen op allerlei manieren verder worden verwerkt door de waterbeheerders, zoals in een kaartbeeld van de toxische druk verschillen per stofgroep tussen waterlichamen, of een analyse van een trend in de tijd. De verkregen resultaten kunnen, door de toepassing van de criteria voor het indelen in chemische effectklassen (vijf kleuren), eenvoudig worden samengevat voor kartering. In een watersysteemanalyse levert dit (dus) een beeld op van een watersysteem waar op verschillende locaties een verschillende toxische druk van elke stofgroep kan bestaan.

3.9 Toxische druk van totale mengsels

De rekentool maakt het mogelijk om de interpretatie op het hoogste aggregatieniveau te brengen, door naar de druk van de totale mengsels kijken. Dit is, uiteraard, de presentatiewijze die in theorie het sterkst overeenkomt met wat de watervlo, de alg of de vis aan netto toxiciteit ‘voelt’ (de waterorganismen kunnen geen onderscheid maken in stofgroepen, ze reageren op de dynamiek van de totale mengsels). In de praktijk kan variatie



in stoffenpakketten de interpretatie bemoeilijken. Het is te verwachten, dat gaandeweg de verdere implementatie van de KRW en gaandeweg het op basis van ervaringen kennen van het goede stoffenpakket voor een gebied, het pakket meetgegevens (namelijk: van representatieve stoffen, voor elke meting) steeds beter zal worden. Op termijn zal de integratie van de gegevens naar de totale toxisch druk de meest gewenste samenvatting zijn van de beschikbare gegevens: 1 kleurenkaart, die gebaseerd is op representatieve metingen van stoffen, kan duizenden meetgegevens samenvatten.

3.10 Wetenschappelijke onzekerheden en praktische zekerheden

Alle genoemde stappen kunnen gepaard gaan met onzekerheden, zoals de vraag naar het representatieve stoffenpakket. Uiteraard is het doel om steeds beter alle onzekerheden weg te nemen, door de gegevens van voorgaande watersysteem-analyses steeds beter te verwerken in nieuwe monitoring-strategieën, metingen en interpretaties, waardoor de onzekerheden kleiner worden. Het doel van de KRW is echter niet om vanuit monitoring een sluitende bewijsvoering op te leveren over de oorzaak-gevolg relatie die in het veld moet bestaan tussen alle stoffen, alle andere drukfactoren en de effecten op de ecologie. Het doel van de KRW is, om de kans vast te stellen dat de KRW doelen niet behaald worden voor een waterlichaam door de aanwezigheid van drukfactoren, en om met de beschikbare gegevens zo nodig actie te nemen om (dreigende) vermindering van de waterkwaliteit teniet te doen. Deze actiegerichte basis betekent dat de interpretatie van toxische druk gegevens – ook als er belangrijke stoffen zouden missen – betekenisvol is. Immers, als de gemeten stoffen A, B en C de toxische druk sterk verhogen, dan is wetenschappelijk volstrekt duidelijk dat het verminderen van de druk van A, B en C betekent dat er belemmeringen worden weggenomen ten aanzien van het bereiken/herstellen van de goede toestand. Dit geldt ook als stof D niet gemeten zou zijn, en misschien wel vijf of tien keer belangrijker kan zijn qua toxiciteit. Met andere woorden: de resultaten over de stoffen die *wel* in de beoordeling zijn betrokken kunnen een goede aanleiding zijn voor maatregelen, met hoge zekerheid. Dit geldt ook als er *niet* gemeten stoffen zouden worden vermoed die belangrijker zouden kunnen zijn. In dit geval wordt uiteraard geadviseerd om stof D te gaan monitoren, vanwege het kennelijke vermoeden van het belang van die stof. Hierbij begint het stappenplan weer bij de vraag naar ‘representatieve stoffen’.

3.11 Interpretatie, prioritering en kartering

De uiteindelijk verkregen toxische druk gegevens worden samen met andere typen gegevens samengevat met behulp van de principes van het DPSIR-schema. Dat leidt tot een interpretatie waarin, met weging van alle typen gegevens, afgeleid wordt wat de kans is dat stoffen, stofgroepen of totale mengsels, het instandhouden van- of het herstellen naar een goede ecologische toestand belemmeren. Dit leidt uiteindelijk tot prioritering van maatregelen, op een typische en logische volgorde:

1. Eerst naar de locatie (het waterlichaam), op basis van rangordening van waterlichamen naar de toxische druk gradatie (“ergste eerst”)
2. Binnen de locaties naar de stofgroep die het sterkst bijdraagt aan de toxische druk, zoals bijvoorbeeld “RWZI-stoffen” als we de stofgroepen naar bronnen gegroepeerd hebben, of “PAKs” als we de stofgroepen naar chemische verwantschappen hebben ingedeeld



3. Binnen de stofgroepen en binnen de locaties kan blijken, dat er sommige stoffen of subgroepen belangrijk zijn, zoals “huishoudelijke schoonmaakmiddelen” die bij RWZI-emissies minder of meer belangrijk zijn dan “medicijnresten”.

Een belangrijke, samenvattende wijze van presenteren van de gegevens zal vaak kunnen bestaan uit karteringen, met behulp van de vijf klassen en hun kleuren. Voorbeelden worden gegeven in Hoofdstuk 4.

3.12 Specifieke situaties

3.12.1 Interpretatie vraagt specifieke aandacht

Het probleem van chemische verontreinigingen bestaat uit meer dan 170.000 deelproblemen (stoffen die in de handel zijn, en hun mengsels). Dit betekent, dat het Chemie-spoor en de rekentool die daarbij toegepast kan worden, op dit moment een hele grote stap maakt in de nuancering van de druk van chemische verontreiniging (van 145 stoffen nu, naar maximaal 12.368 stoffen en hun mengsels in ESFT2), maar hierin ook bescheiden moet zijn.

Dat is:

- Er wordt *niet* gekeken naar specifieke effecten, zoals endocriene effecten
- Er wordt *niet* gekeken naar indirecte effecten (hoewel beredeneerd kan worden dat die bij lage toxische effecten veelal ook laag zullen zijn)
- Er wordt *niet* gekeken naar effecten die ontstaan via doorvergiftiging en/of op de mens.
- En er zijn vast legio situaties waarin de specifieke kennis over een stof kan worden omgezet in een verbeterde berekening van de toxische druk van die stof (er zijn ‘moeilijke stoffen’ zoals de PFAS)

Een belangrijk gevolg van het niet in de (huidige) toxische-druk berekeningen opnemen van specifieke effecten (endocriene effecten), doorvergiftiging en humane effecten is, dat de resultaten van de KRW-toetsing en de ESFT2-beoordeling niet op elkaar lijken aan te sluiten. De KRW-toetsing is bijvoorbeeld voor kwik niet gebaseerd op directe effecten op soortenverzamelingen, maar op andere eindpunten. Dit heeft bijvoorbeeld geleid tot de classificatie ‘voldoet niet’ voor alle Zweedse wateren (EEA, 2012) – door risico’s van kwik voor andere eindpunten – terwijl de mengsel-toxische druk (directe effecten van mengsels van stoffen op aquatische levensgemeenschappen) laag is (Figuur 7). Ook kan de sterk uitgebreide data set voor het afleiden van SSDs (Posthuma et al., 2019b) anders zijn dan de data set die gebruikt is voor het afleiden van milieu kwaliteits normen, en kan bij die laatste afleiding gebruik gemaakt zijn van veiligheidsfactoren. De aansluiting tussen de KRW-normen en de ESFT2 voor een stof is precies passend, indien (a) de MKN gebaseerd is op de directe effecten van een stof op eindpunten zoals groei en reproductie, (b) dezelfde dataset gebruikt is voor de afleiding van de norm en de SSD, en (c) de norm niet lager is dan de 5^e percentiel van de SSD (HC5-NOEC) door toepassing van veiligheidsfactoren bij de normaafleiding. De aansluiting is, doordat deze drie dingen vaak afwijkend zijn, niet exact. Dat hoeft ook niet. Bij de KRW-beoordeling met normen wordt geconstateerd op een situatie voor alle stoffen voldoet aan de beschermende norm, en betekent overschrijding dat de beheerder aandacht moet besteden aan de stoffen waarvoor de norm is overschreden (de overschrijding kan gering, middelmatig of groot zijn). Bij de ESFT2-beoordeling beschouwt de waterbeheerder



een serie waterlichamen in een watersysteemanalyse, en levert de ESFT2 inzicht in de rangorde wat betreft de mate van belemmering van de ecologische toestand. Die rangorde is belangrijk voor het prioriteren van maatregelen. Alleen als er (bijna) geen vervuilde locaties (meer) zijn, dan wordt de vraag naar de precieze aansluiting tussen de KRW-normatieve beoordeling en de ESFT2-rangordening misschien belangrijk voor praktijkbeslissingen.

De wereld van de toxische stoffen is ingewikkeld, maar kan relatief eenvoudig worden samengevat, via enerzijds normoverschrijding en anderzijds de rangordening van de ernst van de effecten (de ESFT-werkwijze). Maar de enorme hoeveelheid stoffen, manieren om metingen te doen, enz. betekent dat de interpretatie van analyses van toxiciteitsgegevens altijd kritisch moet gebeuren. Het is dan ook altijd belangrijk om bij de interpretatie van de resultaten van het Chemie-spoor te evalueren of er reden is om te denken aan afwijkingen of specifieke situaties, en wat die betekenen voor de prioritering van maatregelen.

3.12.2 Specifieke data, stoffen en stofgroepen

Bij het analyseren van concentratie-data met de rekentool van het Chemie-spoor zal blijken, dat er vaak met allerlei specifieke dingen rekening gehouden moet worden. Dat kan niet anders bij de meer dan 170.000 stoffen en hun mengsels die in de beschouwing in principe zouden moeten meetellen. De variatie in blootstellings-situaties is bijzonder hoog, net als de variatie in kennis over stoffen, hun emissies, hun gedrag, hun blootstelling en hun effecten. Naast deze “natuurlijke variatie” is er ook sprake van andere zaken die de analyse voor een stof bijzonder maken, zoals:

- Specifieke kenmerken van de metingen, zoals gefilterde en ongefiterde monsters
- Specifieke kenmerken van stoffen die invloed hebben op de berekeningen van de toxische druk, zoals de kwantificering van de concentratie van NH₃ uit metingen van (meestal) NH₄⁺.

In een apart Protocol wordt voor de afronding van het project samengevat welke stof(groep)specifieke aandachtspunten er bestaan bij het berekenen van de toxische druk van een stof uit de metingen.



4 Voorbeelden van toepassingen

4.1 Overzicht

De vaststelling van de toxische druk van stoffen en mengsels heeft diverse toepassingen in het praktische waterbeheer. Dit leidt onder de KRW tot de volgende opties:

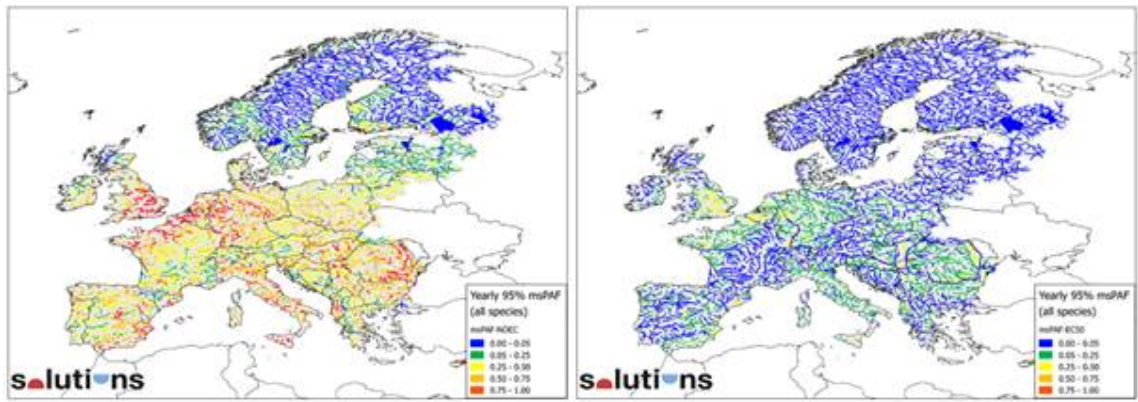
- Verkennend, bij aanvang van een watersysteemanalyse op basis van bestaande data (DPSIR-analyse daarvan)
- Diagnosticerend, bij de diagnose van de oorzaken van verminderde ecologische toestand (met extra gegevens om de toxische druk beter te kwantificeren)
- Evaluerend, bij de evaluatie van de vraag of maatregelen effect hebben gehad (de toxische druk van stoffen, stofgroepen of gehele mengsels zou moeten dalen)

In alle gevallen worden concentratiegegevens van stoffen bijeen gebracht, en als (mengsel) toxische druk uitgewerkt, en daarna gepresenteerd in een toepasselijke vorm die bij de doelstelling van de analyse geformuleerd is. Dat kan zijn: een kaartbeeld van relatieve verschillen in mengsel toxische druk. Maar ook: een grafiek met een stijgende of dalende trend van de toxische druk. Waar nodig kan daarbij gebruikt worden gemaakt van de kleurenschema's gebruikt zoals beschreven in Posthuma et al. (2021a).

4.2 Verkennend prognostisch karteren voor de EU

In Europees onderzoek zijn de gebruiksgegevens van stoffen verwerkt in een gecombineerd model voor emissies, hydrologisch transport, blootstelling en – uiteindelijk – (mengsel) toxische druk. De toxische druk is daarna gekarteerd, als weergave van de verschillen in ruimtelijke Status van de waterkwaliteit (de S uit de DPSIR-context). Het resultaat toont dat de toxische druk van het totale mengsel dat ontstaat door het gebruik van ruim 1800 stoffen in Europa sterk varieert (Figuur 7). Er is sprake van een belangrijk deel van het Europese continent waar het 95%-beschermingsniveau niet wordt gehaald (alles wat niet blauw is in de linker kaart); alleen in het blauw gebied leidt het gebruik van allerlei stoffen niet tot overschrijding van dat (bij de normstelling oorspronkelijk gedefinieerde) niveau. Bij verhoogde concentraties is er ook sprake van verhoging van de msPAF-EC50, een blootstelling met wezenlijke effecten (kaart rechts). Verhogingen van de toxische druk leiden tot belemmeringen van de ecologische toestand. Dat resultaat is beschreven in diverse artikelen (Lemm et al., 2020; Posthuma et al., 2020).





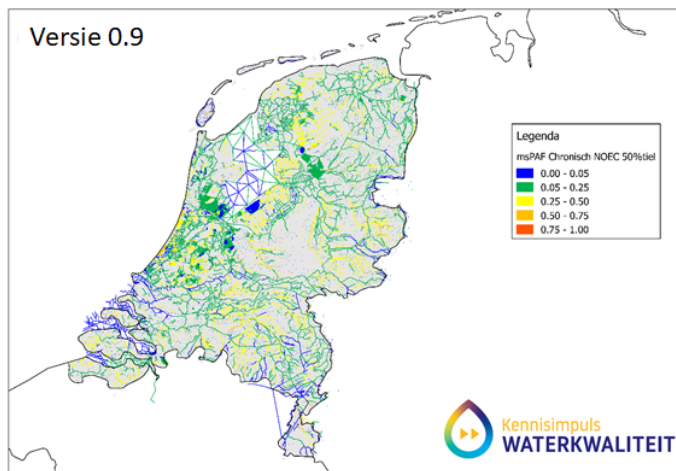
Figuur 7. Verkenning van de ruimtelijke verschillen in toxische druk in een beheergebied, gebaseerd op productie- en gebruiksgegevens van meer dan 1800 stoffen, in combinatie met hydrologische- en toxische druk modellering. Links: kleurschema gerelateerd aan overschrijding van de geen-effectniveaus van blootstelling aan mengsels, en rechts: idem, maar nu gerelateerd aan soortenverlies. Bron: Posthuma, van Gils et al. (2019).

Het nut van deze verkenning is, dat de autoriteiten voor het (kleinere of grotere) gebied en op het bestudeerde schaalniveau – hier de Europese commissie en de nationale overheden – kunnen constateren of er toxische problemen zijn, en waar die dominant zijn. Omdat deze kaarten samengesteld zijn op basis van gegevens over ruim 1800 stoffen kunnen ook detailkaarten van stofgroepen worden gemaakt (niet getoond, voorbeeld zie onder). Het nut daarvan is, uiteraard, dat de maatregelen gericht kunnen worden tegen de juiste stoffen en emissiebronnen: immers, in dat geval zullen de kaarten door de kleuren indiceren welke stofgroepen er op welke locaties domineren..

4.3 Verkennend prognostisch karteren voor Nederland

In Nederlands onderzoek zijn gegevens over de invoer van stoffen uit buitenlandse bronnen, gecombineerd met hydrologische modellering, verwerkt tot een kaartbeeld van de toxische druk van mengsel van geïmporteerde stoffen, stofgroepen en totale toxische druk. Figuur 8 toont een voorbeeld, voor de voorspelde verspreiding van de mengseltoxiciteit van 11 willekeurig gekozen stoffen. Het voorbeeld toont dus de voorspelde ruimtelijke verdeling van de mengsel toxische druk (msPAF-NOEC) van de concentraties van 11 willekeurig gekozen stoffen die in Nederlandse oppervlaktewateren aanwezig zijn door de bovenstroomse bronnen in België en Duitsland. Voldoende bescherming tegen de effecten van mengsels van de elf bestudeerde stoffen worden aangegeven in blauw (msPAF-NOEC<0,05), en onvoldoende bescherming met de overige kleuren. Noot: de lokale verschillen in mengsel toxische druk in Nederlandse watersystemen zijn in dit voorbeeld dus uitsluitend toe te schrijven aan bovenstroomse bronnen in België en Duitsland.





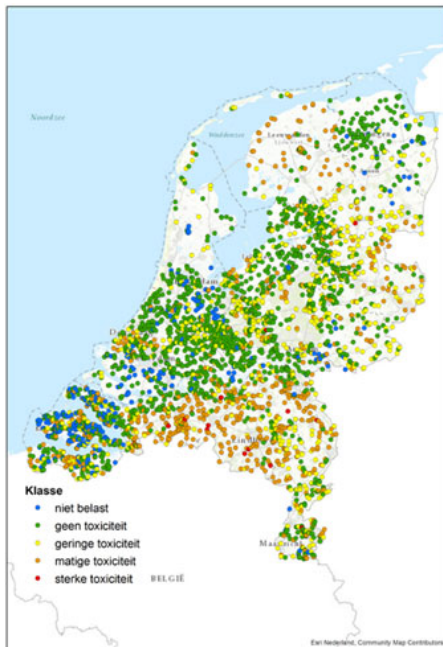
Figuur 8. Kaartbeeld dat bij toepassing van de Startmodule van de ESFT afgeleid kan worden, en dit inzicht geeft in de mogelijke omvang van chemische verontreinigingen, als invoer van een watersystemanalyse. Het voorbeeld toont de mengsel toxische druk (msPAF-NOEC) die afgeleid is uit de Drivers en Pressures analyse van bovenstroomse emissies in België en Duitsland, waarbij de toxiciteit voor Nederlandse waterlichamen is afgeleid door toepassing van landelijke hydrologische modellering. De waterbeheerder wordt op basis van de analyse van Drivers en Pressures in de ESFT-Startmodule geïnformeerd over de waterlichamen waar de problemen met stoffenmengsels waarschijnlijk het hoogst zijn, en door welke stoffen dit waarschijnlijk komt. De kaartbeelden zijn belangrijk, omdat de mengsel toxische druk beperkend is voor het handhaven of het herstellen van de goede ecologische toestand. Bron van de figuur: Van Gils et al. (2021).

Het nut van deze verkenning is, dat de waterbeheerder kan evalueren of e lokale toxische druk afkomstig is uit lokale vormen van landgebruik en -emissies, of (deels) van bovenstroomse bronnen komt. Dit is relevante informatie voor het prioriteren van maatregelen. Het kan blijken, dat een lokale verhoogde toxische druk voor 100% afkomstig is van bovenstroomse bronnen, of juist voor 50%, of dat er alleen lokale bronnen zijn..

4.4 Verkennend diagnostisch karteren

Bij de diagnostische toepassing heeft de waterbeheerder gedetailleerde monitoringgegevens, en worden deze samengevat als mengsel toxische druk. Dit toont aan de waterbeheerder waar de *hot spots* liggen en op welke plaatsen en stofgroepen maatregelen getroffen zouden moeten worden om de ecologische toestand te verbeteren. Een voorbeeld wordt getoond in Figuur 9.





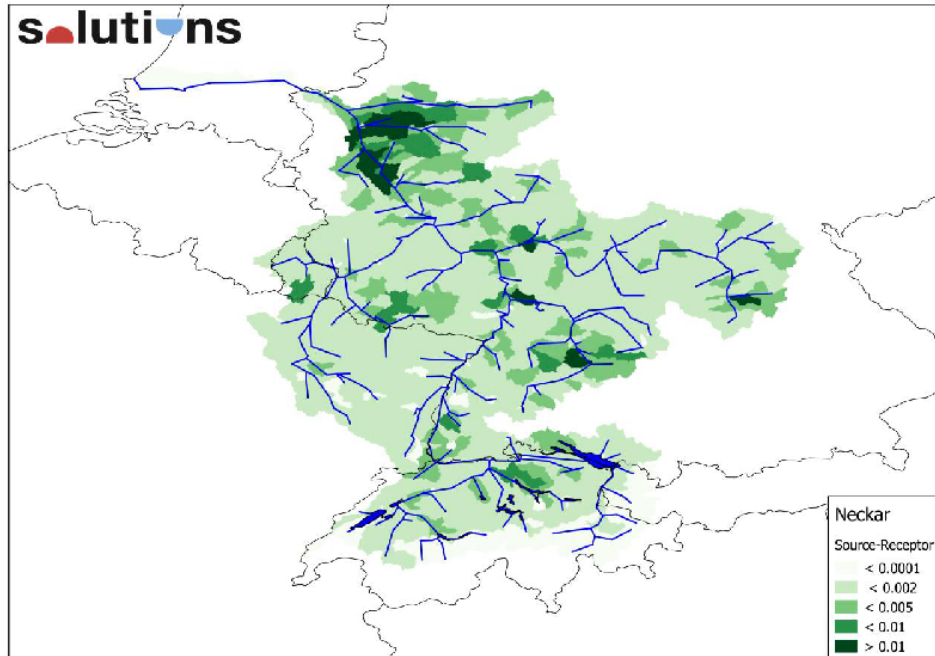
Figuur 9. Kaartbeeld van de mengsel toxische druk van enkele metalen in Nederlandse oppervlaktewateren, op basis van monitoring-gegevens voor de periode 2013-2018 (Postma et al., 2021)

Het nut van deze verkenning is, dat de waterbeheerder voor afzonderlijke stoffen, stofgroepen of het gehele mengsel, kan nagaan in welke waterlichamen de ecologische toestand belemmerd is door mengsels (in dit geval door een stofgroep, die van de metalen).

4.5 Onderzoek aan relatieve dominantie van bronnen

Het is voor een waterbeheerder belangrijk te kunnen onderkennen of de toxiciteit uit lokale bronnen afkomstig is, of ook van bovenstroomse bronnen. En om binnen die bovenstroomse bronnen ook aan te kunnen duiden welke bronnen er dominant zijn. Dergelijke analyses zijn uitgevoerd in het Europese project SOLUTIONS, wat aantoont dat ze in principe mogelijk zijn, dat is: als de hydrologische modellering goed genoeg is, en als de emissies goed ingeschat kunnen worden naar massa, plaats en tijd. Een voorbeeld-resultaat wordt getoond voor de Rijn bij Lobith in Figuur 10.





Figuur 10. Relatieve bijdragen vanuit bovenstroomse bronnen, weergegeven via kleurintensiteit, aan de mengsel-toxiciteit van water in de Rijn bij Lobith. Bron: Van Gils et al. (2021).

Het nut van deze verkenning is dat de waterbeheerder kan identificeren welke bronnen de grootste bijdrage leveren aan de lokale toxische druk, zodat maatregelen gericht kunnen worden tegen de bronnen die het belangrijkste zijn.

4.6 Onderzoek aan relatieve dominantie van stofgroepen

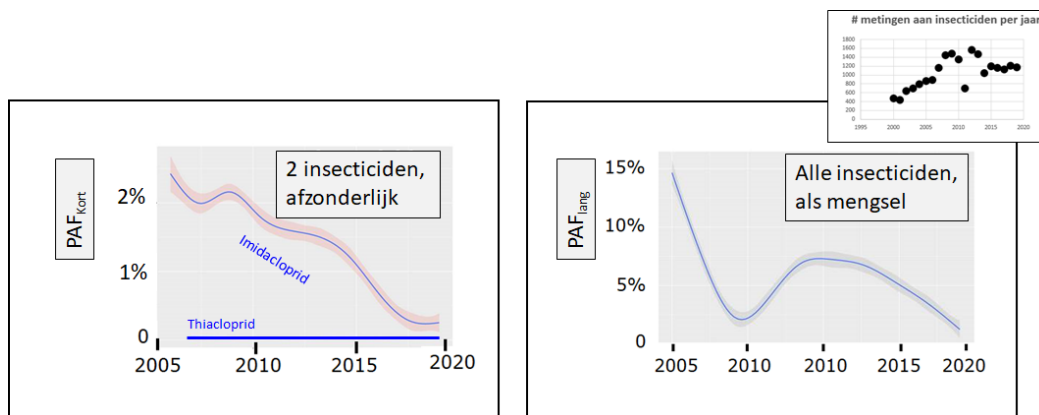
Het is voor een waterbeheerder belangrijk te kunnen onderkennen of er stofgroepen zijn die de toxiciteit van lokale mengsels het sterkst bepalen. Omdat de mengsel-toxische druk afgeleid is uit de toxische druk van elke stof afzonderlijk, en het mogelijk is om die gegevens (ook) te aggregeren naar de toxische druk van naar werkingsmechanisme ingedeelde stofgroepen (zoals de mengsel-toxische druk van insecticiden) of van naar bronterm ingedeelde stofgroepen (zoals: alle stoffen die via een RWZI geëmitteerd worden), kan vastgesteld worden op welke typen stoffen resp. welke bronterm de aandacht gericht moet worden bij het nemen van maatregelen. De rekentool van de ESFT-Toxiciteit (versie 1) levert inzicht in de top-5 van stoffen voor een locatie. De rekentool van de ESF-Toxiciteit versie 2 is nog in ontwikkeling (status 12 mei 2021). Er is gekozen om een relatief laag aantal dominante stoffen te tonen, omdat analyse van literatuurgegevens er op duidt dat er vaak sprake is van dominantie van relatief beperkte aantallen stoffen (Vallotton and Price, 2016).

4.7 Evalueren van het effect van maatregelen

Bij de evaluerende toepassing van het Chemie-spoor van de ESFT2 wordt de mengsel toxische druk vóór en na het nemen van maatregelen vergeleken. In principe zou de toxiciteit



moeten afnemen bij succesvolle maatregelen. Bruikbaarheid is dus gerelateerd aan het (blijven) onderhouden en bekostigen van maatregelen. Een voorbeeld van een eerste verkennende analyse wordt gegeven in Figuur 11. De voorbeeldstudie toont verkennende resultaten van een onderzoek naar temporele verschillen, voor een beheergebied met veel glastuinbouw. Uit de monitoringdata bleek, dat imidacloprid – een stof die veel in de aandacht staat – gaandeweg een lagere toxische druk met zich meebracht. De analyse toont verder, dat dit niet gepaard is gegaan met een stijgende toxische druk van een ander insecticide (voorbeeld: thiacloprid – de getoonde lijn ligt op een laag niveau, maar daalt ook). Analyse van de data van alle gemeten insecticiden suggereert een duidelijke daling, met een dip in 2010. De dip relateert aan een laag aantal metingen. Samengevat is er een duidelijke dalende trend in de toxiciteit van losse insecticiden en van het totale mengsel van insecticiden, waardoor er geen sprake is van een ‘waterbed-effect’ (een middel dat minder wordt ingezet wordt vervangen door een middel dat meer wordt ingezet, met eenzelfde toxische druk). Onderzoek aan de maatregelen suggereerde, dat de dalende trend waarschijnlijk is toe te schrijven aan het op het riool aankoppelen van de tuinbouwbedrijven, en van het afsluiten van oude pijpen die in het watersysteem lekken (Delfland, 2020; Postma and Keijzer, 2018).



Figuur 11. Analyse van de trend in de tijd van (links) twee afzonderlijke insecticiden, en (rechts) alle insecticiden die gemonitord zijn (mengsel toxische druk, msPAF-NOEC). De curves zijn, vanwege het verkennende karakter van deze resultaten, afgeleid met een “smooth-functie”. De aantallen metingen van alle insecticiden vertonen een zeer lage waarde in 2010 (grafische inzet).

Het nut van deze verkenning is dat de waterbeheerder kan evalueren of en in hoeverre de investering in maatregelen nuttig zijn geweest, en of er geen sprake is van een ‘waterbed-effect’. Daarbij is gebleken, dat in een specifiek voorbeeld er sprake is van een zeer effectieve maatregelen, die een groot aantal stoffen aanpakt (aansluiting op de riolering).

Colofon

Deze notitie is geschreven in het kader van het project Toxiciteit van de Kennisimpuls Waterkwaliteit. In de Kennisimpuls werken Rijk, provincies, waterschappen, drinkwaterbedrijven en kennisinstututen aan meer inzicht in de kwaliteit van het grond- en oppervlaktewater en de factoren die deze kwaliteit beïnvloeden. Daarmee kunnen waterbeheerders en andere partijen de juiste maatregelen nemen om de waterkwaliteit te verbeteren en de biodiversiteit te vergroten.



In het programma brengen partijen bestaande en nieuwe kennis bijeen, en maken ze deze kennis (beter) toepasbaar voor de praktijk. Hiermee verstevigen ze de basis onder het waterkwaliteitsbeleid. Het programma is gestart in 2018 en duurt vier jaar. Het wordt gefinancierd door het ministerie van Infrastructuur en Waterstaat, STOWA, waterschappen, provincies en drinkwaterbedrijven.

Referenties

- Bernstein, P.L. (1996) *Against the gods: the remarkable story of risk.*, John Wiley & Sons, Inc., New York, U.S.A.
- De Zwart, D. and Posthuma, L. 2005. Complex mixture toxicity for single and multiple species: Proposed methodologies. *Environmental Toxicology and Chemistry* 24(10), 2665-2676.
- Delfland, H.v. 2020 Stand van zaken toxiciteit oppervlaktewater Delfland, HHR Delfland, brief kenmerk: 1476635, dd 8 december 2020.
- Dulio, V. and Von der Ohe, P.C. 2013 NORMAN Prioritisation framework for emerging substances, NORMAN Association, N° W604002510, Verneuil en Halatte, (France).
- EEA 2012 European waters — assessment of status and pressures, EEA Report No 8/2012 EEA, Copenhagen, Denmark.
- EEA 2018 European waters — assessment of status and pressures <https://www.eea.europa.eu/publications/state-of-water>.
- Lassiter, R.R. and Hallam, T.G. 1990. Survival of the fittest: Implications for acute effects of lipophilic chemicals on aquatic populations. *Environmental Toxicology and Chemistry* 9(5), 585-595.
- Lemm, J.U., Venohr, M., Globevnik, L., Stefanidis, K., Panagopoulos, Y., van Gils, J., Posthuma, L., Kristensen, P., Feld, C.K., Mahnkopf, J., Hering, D. and Birk, S. 2020. Multiple stressors determine river ecological status at the European scale: Towards an integrated understanding of river status deterioration. *Glob Chang Biol*.
- Posthuma, L., Altenburger, R., Backhaus, T., Kortenkamp, A., Müller, C., Focks, A., de Zwart, D. and Brack, W. 2019a. Improved component-based methods for mixture risk assessment are key to characterize complex chemical pollution in surface waters. *Environmental Sciences Europe* 31(1), 70.
- Posthuma, L., De Zwart, D., Osté, L., Van der Oost, R. and Postma, J. 2016 *Ecologische Sleutelfactor Toxiciteit. Deel 1: Methode voor het in beeld brengen van de effecten van giftige stoffen in oppervlaktewater*, STOWA, Amersfoort, the Netherlands.
- Posthuma, L., Slootweg, J., Pronk, T., De Baat, M.L. and Van den Berg, S. 2021a *Classificatie en communicatie van de graad van chemische verontreiniging. Deltafact. Versie 30 oktober 2021.*, STOWA, Amersfoort, the Netherlands.
- Posthuma, L., Suter, G.W.I. and Traas, T.P. (2002) *Species sensitivity distributions in ecotoxicology*, CRC-Press, Boca Raton, FL, U.S.A.
- Posthuma, L., Van Driezum, I. and Pronk, T. 2021b *Chemische verontreiniging en effecten op ecologie en de zuiveringsinspanning. Achtergronddocument beschikbare kennis bij de sleutelfactor Toxiciteit. Versie 1, 30 oktober 2021.* . Kennis Impuls Water Kwaliteit (ed).
- Posthuma, L., van Gils, J., Zijp, M.C., van de Meent, D. and de Zwart, D. 2019b. Species sensitivity distributions for use in environmental protection, assessment, and management of aquatic ecosystems for 12 386 chemicals. *Environmental Toxicology and Chemistry* 38(4), 905-917.
- Posthuma, L., Zijp, M.C., De Zwart, D., Van de Meent, D., Globevnik, L., Koprivsek, M., Focks, A., Van Gils, J. and Birk, S. 2020. Chemical pollution imposes limitations to the ecological status of European surface waters. *Scientific Reports* 10(1), 14825.



- Postma, J., Keijzers, R., Slootweg, J. and Posthuma, L. 2021 Toxiciteit van Nederlandse oppervlaktewateren in de periode 2013-2018, STOWA-rapport 2021-43, Amersfoort, the Netherlands.
- Postma, J.F. and Keijzer, C.M. 2018 Ecologische Sleutelfactor Toxiciteit Berekeningen over de jaren 2009-2017, Ecofide, Weesp, 6 maart 2018.
- Vallotton, N. and Price, P.S. 2016. Use of the Maximum Cumulative Ratio As an Approach for Prioritizing Aquatic Coexposure to Plant Protection Products: A Case Study of a Large Surface Water Monitoring Database. Environmental Science and Technology 50(10), 5286-5293.
- van de Meent, D., de Zwart, D. and Posthuma, L. 2020. Screening-Level Estimates of Environmental Release Rates, Predicted Exposures, and Toxic Pressures of Currently Used Chemicals. Environmental Toxicology and Chemistry 39(9), 1839-1851.
- Van Gils, J., Van den Meiracker, R., Van der Linden, A. and Altena, W. 2021 Modellering van nieuwe stoffen in oppervlaktewater.
- Modelaanpassing, validatie. Achtergronddocument beschikbare kennis bij de sleutelfactor Toxiciteit. Versie 1, 30 november 2021. . Kennis Impuls Water Kwaliteit (ed).

