

Sleutelfactor Toxiciteit



Protocol gebruik rekentool Chemie-spoor SFT2 (versie 2.0)

Achtergronddocument beschikbare kennis bij de sleutelfactor Toxiciteit

Versie: 1 augustus 2024

Auteurs:

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

Contact: leo.posthuma@rivm.nl

Datum: 1 augustus 2024

Bij verwijzing naar deze notitie graag de volgende gegevens gebruiken:
Posthuma, L., Dekker, E., J. Slootweg, R. Koopman, en L. Osté (2024). Protocol gebruik
rekentool Chemie-spoor SFT2. Achtergronddocument beschikbare kennis bij de sleutelfactor
Toxiciteit. Versie 2.0, 1 augustus 2024.

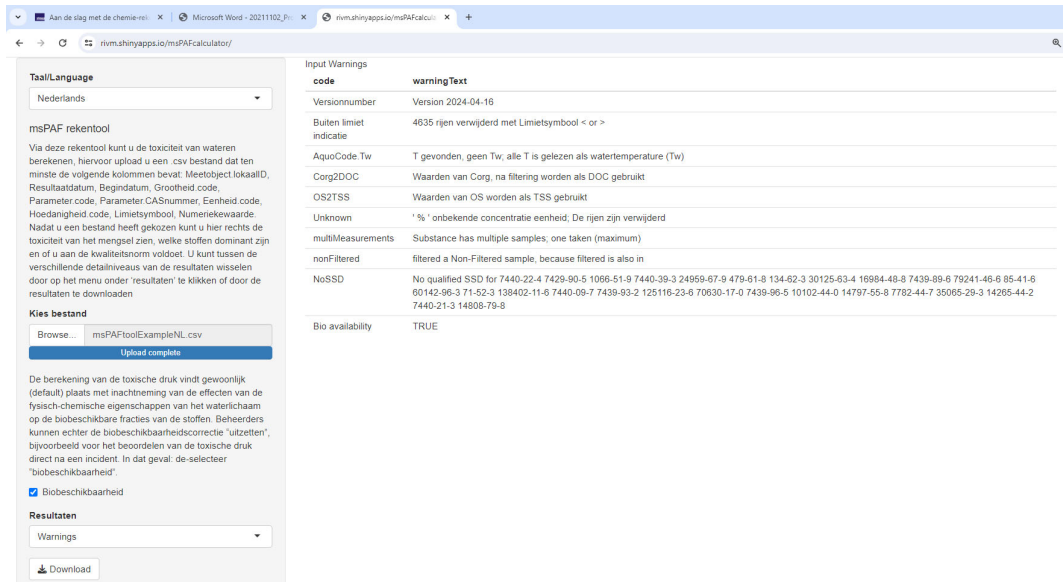
<https://www.sleutelfactortoxiciteit.nl/verdieping/werken-met-het-chemiespoor/aan-de-slag-met-de-chemie-rekentool> .



Highlights

1. De rekentool van het Chemie-spoor van de sleutelfactor toxiciteit, versie 2.0 (SFT2) berekent de toxische druk van stoffen, stofgroepen en totale mengsels
2. Verschillen in toxische druk worden uitgedrukt in vijf klassen van chemische verontreiniging
3. Het gebruiksdoel hiervan is het vaststellen van de noodzaak en prioriteit van maatregelen om de KW-doelen (goede waterkwaliteit) te behalen, via bescherming (als dat kan) of herstel (als dat moet).
4. De klassen 1 tot en met 5 van het Chemie-spoor duiden op toenemende belemmeringen voor het handhaven van- of herstellen naar een goede ecologische toestand.
5. De rekentool is via het web beschikbaar, en het gebruik van de rekentool wordt beschreven in deze handleiding.

Grafische samenvatting



code	warningText
Versionnummer	Version 2024-04-16
Buiten limiet indicatie	4635 rijen verwijderd met Limietsymbool < or >
AquoCode.Tw	T gevonden, geen Tw, alle T is gelezen als watertemperature (Tw)
Corg2DOC	Waarden van Corg, na filtering worden als DOC gebruikt
OS2TSS	Waarden van OS worden als TSS gebruikt
Unknown	'%' onbekende concentratie eenheid. De rijen zijn verwijderd
multiMeasurements	Substance has multiple samples, one taken (maximum)
nonFiltered	filtered a Non-Filtered sample, because filtered is also in
NoSSD	No qualified SSD for 7440-22-4 7429-90-5 1096-51-9 7440-39-3 24956-67-9 479-61-8 134-82-3 30125-63-4 18984-48-8 7439-89-6 79241-46-6 85-41-6 60142-96-3 71-52-3 138402-11-6 7440-09-7 7439-93-2 125116-23-6 70630-17-0 7439-96-5 10102-44-0 14797-55-8 7782-44-7 35065-29-3 14265-44-2 7440-21-3 14808-79-8
Bio availability	TRUE

Het start-scherm van de webapplicatie. De gebruiker kiest een invoerfile, waarvan het *format* gelijk is aan de informatie die aangeleverd wordt aan het Informatie Huis Water. De webapplicatie toont dan eerst de eventuele invoerfouten ('Warnings', zoals een AquoCode met een spelfout). Nadat die zijn opgelost, kan de gebruiker de resultaten exporteren naar Excel ('Download'). In de Excel-export worden de resultaten samengevat voor de watersysteemverkenning



Inhoudsopgave

Highlights	2
Grafische samenvatting	2
Inhoudsopgave.....	3
1 Inleiding.....	5
2 De context waarin de rekentool wordt toegepast.....	6
2.1 Schaalniveau: watersysteemanalyse	6
2.2 Representativiteit: lokaal voorkomende stoffen beoordelen	7
2.3 Interpretatie.....	8
2.4 De toxische druk als klassen van chemische verontreiniging	8
3 Technische handleiding.....	12
3.1 Algemeen.....	12
3.2 Stap 1: Verzamel waterkwaliteitsdata	12
3.3 Stap 2: Formateer de data voor invoer in de rekentool.....	12
3.3.1 Het Excelbestand	12
3.3.2 Omgaan met bepalingsgrenzen.....	14
3.3.3 Omgaan met lage PAF-waarden: ondergrens interpretatie.....	14
3.3.4 Omgaan met hoedanigheden	15
3.3.5 Omgaan met extreme waarden	15
3.3.6 Rekening houden met stoffen die van nature voorkomen	15
3.3.7 Rekening houden met som-metingen	15
3.3.8 Rekening houden met de kwaliteit van de SSD-modellen	16
3.3.9 Rekening houden met variabele blootstelling.....	17
3.4 Stap 3: Controleer decimaaltkens in Excel	17
3.5 Stap 4: Starten van de tool.....	18
3.6 Stap 5: Landingspagina en knoppen.....	19
3.7 Stap 6: Lees de invoerdata in.....	20
3.8 Stap 7: Evalueer de waarschuwingen en los invoerproblemen op.....	20
3.9 Stap 8: Evalueer op het scherm de toxische druk uitvoer.....	21
3.9.1 PAFtable	21
3.9.2 msPAFacute.....	23
3.9.3 msPAFchronic	24
3.9.4 msPAFqualitative	25
3.10 Stap 9: Exporteer de toxische druk uitvoer.....	25
4 Van uitvoergegevens naar interpretatie voor de KRW-doelen.....	28
4.1 Van ruwe data naar goede samenvatting van resultaten.....	28
4.2 Verschillende doelen van de watersysteemanalyse	28
4.2.1 Vraagstellingen.....	28
4.2.2 Ruimtelijke variatie in toxische druk: kaartbeelden als eindresultaat	29
4.2.3 Trendanalyse als eindresultaat.....	29
Colofon.....	31
Versiebeheer.....	31



Samenvatting

De rekentool van het Chemiespoor van de sleutfactor Toxiciteit versie 2.0 (afgekort als SFT2) is een webapplicatie die de toxische druk van stoffen, stofgroepen en gehele mengsels berekent, op basis van monitoringdata. De toxische druk is belangrijk om te kennen, omdat de ecologische toestand van een watersysteem steeds sterker belemmerd wordt door mengsels van stoffen naarmate de toxische druk hoger wordt. De rekentool is een verbetering en uitbreiding van de rekentool die in 2016 hiervoor beschikbaar was gesteld, onder de eerste versie van de sleutfactor.

Dit protocol geeft een gebruiksaanwijzing en toelichting bij de gebruikte rekenmethodes. Het protocol geeft informatie over het verzamelen van gegevens (monitoring) en uiteindelijk de interpretatie, en beschrijft hoe de rekentool van het Chemiespoor van de SFT2 gebruikt moet worden.

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

Release Notes versie 2.0

Versie 2.0 van de SFT2-rekentool voor het bepalen van de toxische druk is gemaakt vanwege twee redenen.

De hoofdreden is, dat de rekentool nu ook geschikt is voor internationaal gebruik. Een belangrijk kenmerk van de Kaderrichtlijn Water (KRW) is dat deze richtlijn gebaseerd is op het watersysteem. Nederland is via de stroomgebieden van vier grote rivieren (Rijn, Maas, Schelde en Eems) internationaal verbonden met bovenstrooms achterland in Duitsland, België en Frankrijk. Om in internationaal verband te kunnen werken aan preventieve of mitigerende maatregelen voor de chemische waterkwaliteit is een internationale rekentool, met toelichting, van groot belang. De rekentool versie 2.0 heeft nu dus een keuzemenu, waarbij Nederlandse en internationale gebruikers kunnen kiezen uit de Nederlandse of Engelstalige versie van de rekentool. De uitslagen zijn identiek, maar er zijn verschillen in de invoerdata (bijvoorbeeld wat betreft naamgeving stoffen, en wat betreft het gebruik van decimaal-symbolen) en uitvoerdata (naamgeving van de klassen in het Nederlands resp. het Engels).

De tweede reden is het doorvoeren van kleine wijzigingen, die in de rekentool aangebracht zijn naar aanleiding van vragen van gebruikers. De belangrijkste is dat er in versie 1.0 voor de eindgebruiker niet voldoende duidelijk was dat verwaarloosbare Potentially Affected Fraction (PAF, de fractie van soorten die "last" hebben van de betreffende substantie) worden weggelaten uit de resultaat tabellen, en ook voor de berekening van het gecombineerde effect (de msPAF). Dit is nu expliciet gemaakt in de uitvoer. Op verzoek van enkele waterbeheerders is ook een knop aangebracht, waarmee de gebruiker de biobeschikbaarheidscorrectie kan uitschakelen. Die staat standaard aangevinkt, voor de normale situatie van een watersysteemanalyse waarbij aanwezige stoffen deels minder beschikbaar zijn door interacties met fysisch-chemische elementen van het water. Bij incidenten hebben die interacties nog niet plaatsgevonden, en kan de toxische druk van de plotseling aanwezige stoffen berekend worden zonder de verminderde beschikbaarheid. Een verdere kleine verbetering is het herstel van een onvolkomenheid die werd opgemerkt door een gebruiker. Als in een sample (plaats-tijd combinatie) de naam van een stof twee (of meer) keer voorkomt dan wordt normaliter de hoogste waarde genomen. Maar als er concentraties zijn voor en na filtratie dan moet de concentratie na filtratie worden genomen. Dat is doorgevoerd in de rekenregels. Dit probleem kan de gebruiker ook zelf voorkomen door de Hoedanigheid.code te laten eindigen op "nf". Als derde kleine verbetering is de interpretatie van de invoerfile verbeterd. Als bij de Hoedanigheid.code "N" of "Nnf" wordt gegeven dan is de concentratie als N ingevoerd en moet bij de interpretatie worden omgerekend naar de concentratie voor het hele molecuul. Vergelijkbaar geldt dit voor "P" en "Pnf". Deze omrekening is in versie 1.0 niet goed doorgevoerd. Bij versie 2.0 is deze interpretatiefout gecorrigeerd.



1 Inleiding

De rekentool Versie 2.0 van het Chemiespoor is onderdeel van de sleutelfactor Toxiciteit (SFT).

De tool is beschikbaar onder de link: <https://www.sleutelfactortoxiciteit.nl/verdieping/werken-met-het-chemiespoor/aan-de-slag-met-de-chemie-rekentool>.

De rekentool berekent vanuit concentraties van stoffen in oppervlaktewater de toxische druk van die stoffen, waarbij de uitkomsten gebruikt kunnen worden om ook de toxische druk van een mengsel van stoffen in een stofgroep (bijvoorbeeld; insecticiden) of van alle stoffen samen vast te stellen. Inzicht in de (mengsel)toxische druk in een watersysteem is belangrijk, omdat deze parameter samenhangt met de mate van belemmering van de biodiversiteit in aquatische ecosystemen (en de ecologische toestandsklasse): hoe hoger de waarde, hoe sterker de belemmering van de goede waterkwaliteit, en hoe hoger de noodzaak van maatregelen.

Dit protocol beschrijft in hoofdstuk 2 de context van het gebruik van de rekentool. Hoofdstuk 3 beschrijft hoe de rekentool gebruikt moet worden. In hoofdstuk 4 wordt kort geïllustreerd hoe de resultaten van de rekentool worden samengevat.



2 De context waarin de rekentool wordt toegepast

Er zijn drie zeer belangrijke gegevens die bij de toepassing van de rekentool van toepassing zijn:

1. Schaalniveau: gebruik de rekentool in een watersysteemanalyse
2. Representativiteit: voer de concentraties van de lokaal bedreigende stoffen in
3. Interpretatie: omdat de uitkomsten helpen om maatregelen te prioriteren begint de interpretatie bij de hogere toxische drukken

De uitleg van deze punten staat in de volgende paragrafen.

2.1 Schaalniveau: watersysteemanalyse

De rekentool van het Chemie-spoor van de sleutelfactor Toxiciteit Versie 2.0 wordt gebruikt in een watersysteemanalyse. Dat is geheel overeenkomstig het basisprincipe van de kaderrichtlijn water (KRW), waarbij het uitgangspunt het hydrologische systeem is.

De rekentool geeft dus inzicht in de verschillen in toxische druk van stoffen, stofgroepen en gehele mengsels in het kader van het hydrologische systeem. De rekentool geeft inzicht in de *verschillen* in (mengsel)toxische druk tussen hydrologische eenheden, of gedurende de verschillende perioden in een jaar. De resultaten geven inzicht in de vraag waar de toxiciteit het meest belemmerend is voor het handhaven of herstellen van de lokale biodiversiteit (ecologische toestand; een vergelijkende vraag), wat weergegeven wordt in vijf klassen van mate van chemische verontreiniging. Hierbij wordt in ecologische zin geen onderscheid gemaakt tussen stofgroepen, zoals prioritair stoffen of Nederlandse specifieke stoffen en overige stoffen. Het zijn immers de lokale mengsels als totaliteit die bepalend zijn voor de mate van belemmering.

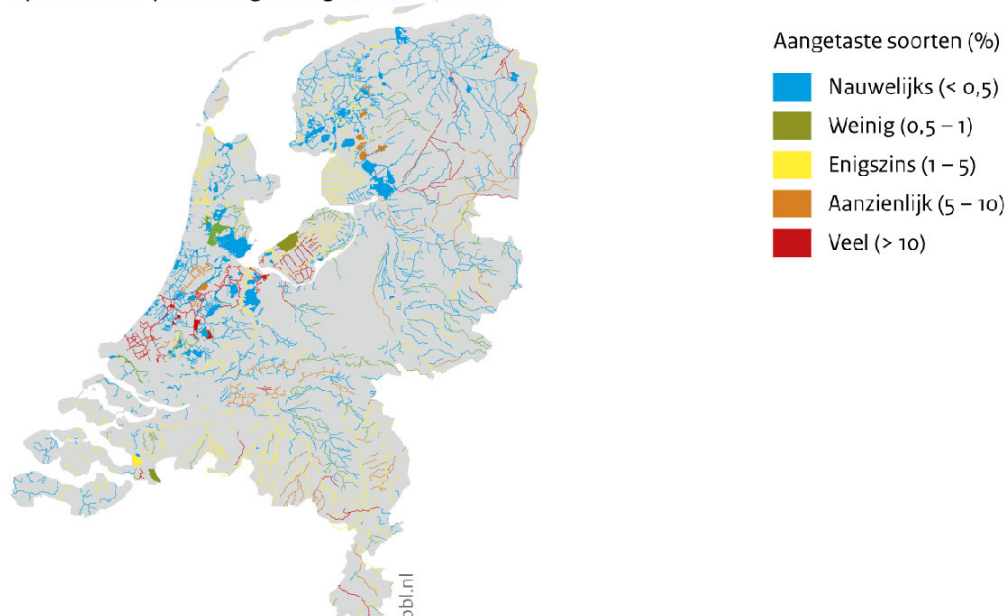
Voor het afleiden van maatregelen of het verkrijgen van specifieke inzichten kan de invoer specifiek bestaan uit bijvoorbeeld alleen prioritair stoffen, omdat de waterbeheerder dan inzicht krijgt in de toxische druk van deze stofgroep, die in geheel Europa vaak belemmerend werkt, en waarop ook op Europees niveau beleid wordt gevoerd. De invoer kan ook bestaan uit alleen Nederland-specifieke stoffen, of stoffen op de Watch List (<https://eur-lex.europa.eu/legal-content/NL/TXT/PDF/?uri=CELEX%3A32020D1161&from=EN>). Waterbeheerders kunnen dus door het kiezen van invoergegevens verschillende vragen beantwoorden.

De resultaten van de rekentool geven inzicht in de vraag welke hydrologische eenheden het sterkst belast zijn, en voor die eenheden welke stofgroepen er lokaal sterk bijdragen. Beide typen resultaten zijn behulpzaam bij het identificeren van de noodzaak om maatregelen te overwegen, en het kiezen en prioriteren ervan. Een typerend voorbeeld van de resultaten van een watersysteemanalyse voor chemische verontreiniging wordt gegeven in de kaart van Figuur 1.



Berekende toxische druk per waterlichaam, 2018

Op basis van percentage aangetaste soorten



Figuur 1. Voorbeeld van de eindresultaten van een watersysteemanalyse met de Chemie-rekentool. De kleuren vertegenwoordigen verschillende mate van belemmering van de ecologische toestand, gebaseerd op berekening van de toxische druk van lokale mengsels. Bron: PBL (2020). Noot: de door PBL gehanteerde kleuren zijn willekeurig gekozen om verschillen in toxische druk zichtbaar te maken; dit verschilt van de SFT2-kleurklassen, die afgeleid zijn door de kalibratie van toxische druk op gradaties van ecologische effecten. De SFT2-kleurklassen en -namen worden elders in dit document toegelicht.

2.2 Representativiteit: lokaal voorkomende stoffen beoordelen

De rekentool van het Chemie-spoor werkt met concentraties van stoffen in het watersysteem. Dat kunnen gemeten stoffen zijn (monitoring) of voorspelde stofconcentraties (modellering). Belangrijk is, dat de mengsel toxische druk zo veel mogelijk berekend wordt met *alle* stoffen die lokaal voorkomen of voor kunnen gaan komen. In de praktijk is het vooral belangrijk dat de stoffen die een belangrijke bijdrage leveren aan de mengsel-toxische druk in de analyses worden opgenomen. Immers, stoffen die niet gemeten of gemodelleerd worden kunnen niet in de berekening bijdragen aan de toxische druk. Met andere woorden: de berekende toxische druk van stofgroepen of mengsels is altijd een *onderschatting van de werkelijke toxische druk*.

Voor het afleiden van maatregelen hoeft dat niet erg te zijn: als bijvoorbeeld vier stoffen samen een sterk verhoogde toxische druk opleveren (zelfs als er nog 10 andere stoffen bij kunnen dragen, maar niet gemeten zijn), dan kunnen de maatregelen tegen die vier stoffen al belangrijke verbeteringen in de waterkwaliteit opleveren. Toch blijft het belangrijk en logisch om ernaar te streven dat de berekeningen met de rekentool representatief zijn voor de toxische druk in het aquatisch systeem. Dat betekent, dat de waterbeheerder moet streven naar het zo goed mogelijk beoordelen van de stoffen die lokaal voor kunnen komen.

Er zijn twee remedies die in ESFT2 ingezet kunnen worden om het probleem van niet-gemeten-wel-aanwezige stoffen te verminderen:



1. Gebruik de ESFT2-opzoektabel "landgebruik - stoffenlijst" op de website (zie <https://www.sleutelfactortoxiciteit.nl/aan-de-slag/de-pressure-van-dpsir>). Door te kijken naar lokaal (en bovenstreams) landgebruik, en de bijbehorende stoffen af te lezen, is de kans groot dan alle relevante stoffen gemeten worden.
Noot: De lijst stoffen die lokaal voor kunnen komen bestaat uit de som van drie lijsten:
 - a. De stoffen die in Europa vaak worden aangetroffen (de prioritaire stoffen)
 - b. De stoffen die in de stroomgebieden van de Nederlandse grote rivieren vaak worden aangetroffen (de Nederland-specifieke stoffen), en (dus)
 - c. De lokaal of regionaal relevante stoffen, die door de lokale vormen van landgebruik in de regio wel een probleem vormen, maar dat niet zijn op de schaal van Nederland of Europa. De opzoektabel geeft suggesties voor deze lijst.
2. Vat de resultaten van de analyses samen voor een aantal stofgroepen, in plaats van alleen de toxische druk van de totale mengsels. Dit verduidelijkt de uitkomsten, en geeft direct ook inzicht in potentieel nut van maatregelen.
Stel dat er bijvoorbeeld polycyclische aromatische koolwaterstoffen (PAKs) en bestrijdingsmiddelen (BMs) worden gemeten, bij PAKs altijd alle 16 stoffen, bij de BMs allerlei middelen. Bij de BMs weten we, dat het middelengebruik per seizoen wisselt.
 - Als in het ene geval alle stoffen samen worden genomen, kan de mengseltoxischedruk sterk variëren, al naar gelang de BM-metingen (of die namelijk de dat seizoen gebruikte middelen "afdekken"). De resultaten variëren erg, en je kunt niet zien of de PAKs ook variëren.
 - Als in het andere geval de PAKs en de BMs apart genomen worden, verhoogt dit het inzicht in de betekenis van de resultaten.

2.3 Interpretatie

Het is belangrijk om bij de interpretatie twee vuistregels te hanteren:

1. Begin bovenaan:
Prioriteer herstelmaatregelen om te beginnen vanuit de hoogste toxische druk-locaties. Op die locaties hebben maatregelen het meeste zin.
2. Voorkóm over-interpretaties die geen ecologische betekenis hebben
Interpreteer (zeer) lage berekende waarden van de toxische druk niet preciezer dan mogelijk is. Als er bijvoorbeeld 100 soorten insecten in een gebied kunnen voorkomen is het interpreteren van een toxische druk (PAF of msPAF) <0.01 niet betekenisvol. De waarde 0.01 duidt immers op "1 op 100 soorten zou worden aangetast", en een berekende waarde van 0.001 betekent dus gewoon 'zeer lage druk' en (waarschijnlijk) geen aantasting van soorten.

Uiteraard geldt bij vuistregels dat dit de eenvoudigste, algemene aanpak is maar dat er bij nader inzien uitzonderingen kunnen zijn. Voor vuistregel 1 is het namelijk ook zo, dat de hoogste verontreinigingsklasse prioritair zou zijn qua maatregelen, maar tegelijk geldt misschien wel dat die maatregelen complex of onbetaalbaar zouden zijn. *Praktische* overwegingen kunnen daardoor zorgen voor maatregelen die geprioriteerd worden tegen minder ernstige situaties die makkelijker of goedkoper kunnen worden aangepakt. Het is het totaalbeeld (volgens het beginsel van de watersysteem-analyse) dat voor de samenwerkende waterbeheerders leidt tot prioritaire en haalbare maatregelen.

2.4 De toxische druk als klassen van chemische verontreiniging

De rekentool levert uitvoergegevens die inzicht geven in de toxische druk van afzonderlijke stoffen, stofgroepen of hun totale mengsels. De rekentool bepaalt bijvoorbeeld eerst de toxische druk van 16 PAKs, daarna de toxische druk van het PAK-mengsel, en daarna de toxische druk van dat PAK-mengsel en eventuele andere stoffen en stofgroepen samen. Alle berekende waarden leveren inzichten in de

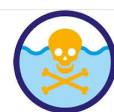


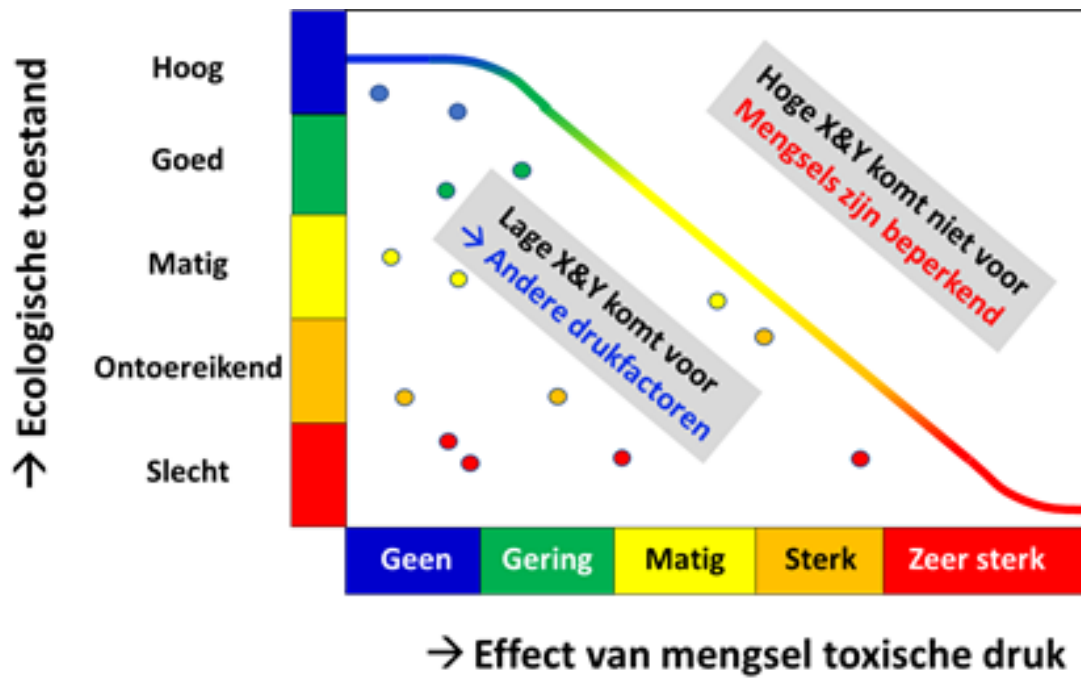
toxische druk tussen locaties, of tussen tijdstippen (trends), waarbij de waterbeheerder soms data voor een groot gebied wil samenvatten (en vooral kijkt naar de totale toxische druk), en soms focust op een belangrijke stofgroep, die veel bijdraagt aan die toxiciteit. Omdat de watersysteemverkenning bedoeld is uiteindelijk af te kunnen leiden of, waar en waartegen maatregelen nodig zijn, is de uitvoer van de rekentool samengevat in klassen. Die zijn toepasbaar voor stoffen, stofgroepen en totale mengsels, als hulp bij interpretatie en communicatie. Er zijn vijf klassen van chemische verontreiniging afgeleid, overeenkomstig de vijf klassen van de ecologische toestand. Bij het definiëren van de vijf klassen worden de gegevens van twee toxische druk maatlaten samengevoegd:

- De chronische toxische druk wordt berekend als de fractie soorten die blootgesteld wordt boven het geen-effect niveau (NOEC, *No Observed Effect Concentration*); de soorten ondervinden een begin van hinder, waarbij er een begin van effecten is op kenmerken zoals groei en reproductie.
- De acute toxische druk wordt berekend als de fractie soorten die blootgesteld wordt boven het EC50-niveau, waarbij empirische studies hebben aangetoond dat een stijgende msPAF-EC50 samengaat met een stijgende mate van soortenverlies, en een sterkere belemmering van de ecologische toestand

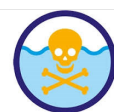
Het concept van de indeling naar de klassen van chemische verontreiniging wordt geïllustreerd in Figuur 2. Daarin wordt getoond, dat de ecologische toestand (Y) allerlei waarden kan hebben (de punten), door multiple stress. De sigmoïdale lijn is van al die waarnemingen de zogenoemde 'kwantiel-regressie', de lijn die de 'buiten-envelop' van de waarnemingen beschrijft, en die het volgende betekent. Als er 'rechtsboven' geen waarnemingen zijn, betekent dit dat de factor op de X-as bij verhoogde waarden van X belemmerend werkt op Y (Cade and Noon, 2003). Omdat dat effect inderdaad is waargenomen, en toxische druk van mengsels dus belemmerend bleek te zijn voor de ecologische toestand (Posthuma et al., 2020), is de klassenindeling voor chemische verontreiniging afgeleid, als volgt (zie ook Postma et al. (2021):

- De klasse 'blauw' wordt gekenmerkt door de afwezigheid van menselijke invloeden, en heeft dus geen of verwaarloosbare verhoogde toxische druk (msPAF-NOEC).
- De klasse 'groen' wordt gekenmerkt door een zekere mate van blootstelling aan een stof, stofgroep of mengsel, maar die blootstelling heeft nog geen significante effecten op de biodiversiteit (ecologische toestand); de bovengrens van de klasse groen wordt gedefinieerd door het aloude principe dat bekend staat als het 95%-beschermingsniveau. Dat is de concentratie waarbij 95% van de soorten onder hun geen-effectniveau (NOEC) zou zijn blootgesteld. Per stof is dat gelijk aan de HC5-concentratie, en voor een mengsel is dat gelijk aan $msPAF-NOEC < 5\%$.
- De klassen geel, oranje en rood worden gekenmerkt door een toenemende mate van soortenverlies, en belemmering van de ecologische toestand. De klassengrenzen zijn afgeleid van een aantal veldstudies.





Figuur 2. Het concept van de indeling van chemische verontreiniging in vijf klassen. Hoe hoger de graad van verontreiniging, hoe sterker de ecologische toestand belemmerd wordt.

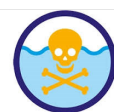


De klassengrenzen, hun context en de erbij te gebruiken termen worden samengevat in Tabel 1.

Tabel 1. Klassegrenzen voor ecologische toestand en chemische verontreinigingen.

		KRW-bescherming		KRW-Herstelmaatregelen				
IN WOORDEN, cf. KRW	Chemische toestand	Voldoet		Voldoet niet			Classificatie EU-brede prioritaire stoffen	
	Specifieke verontreinigende stoffen	Voldoet		Voldoet niet			Classificatie specifieke verontreinigende stoffen	
	Ecologische toestand	Zeer goed	Goed	Matig	Ontoereikend	Slecht	Gradueel toenemende effecten van drukfactoren	
NIEUW: VIJFKLASSEN-SYSTEEM	Chemische verontreinigingsklassen	Goed	Gering	Matig	Hoog	Zeer hoog	Graduele indeling belemmering van de ecologische toestand door mengsels	
	Grenswaarden toxische druk (msPAF)	msPAF-NOEC≤0,005	msPAF-NOEC=0,005 msPAF-NOEC≤0,05	msPAF-NOEC<0,05 msPAF-EC50≤0,005	0,005 < msPAF-EC50 ≤ 0,1	msPAF-EC50>0,1	Grenswaarden (toegepast in rekentool SFT2)	
	In woorden	Begin van hinder bij maximaal 1 op de 200 soorten	Begin van hinder bij meer dan 1 op 200 maar maximaal 1 op de 20 soorten (>95% beschermd 1)	Effecten bij maximaal 1 op 200 soorten	Effecten bij maximaal 1 op 10 soorten	Effecten bij meer dan 1 op 10 soorten	Betekenis / interpretatie voor rapportage en communicatie	

- (1) De grenswaarde bij msPAF-NOEC “0,05” duidt op het 95%-beschermingsniveau, dat bij de normstelling voor stoffen gehanteerd is om de *Hazardous Concentration for 5% of the species*, HC5 (concreet: de HC5-NOEC) te bepalen, als wetenschappelijke basis onder het beleidsmatige Maximaal Toelaatbaar Risico concept (MTR). Bij de MTR is 5% van de soorten blootgesteld op NOEC-niveau, en is 95% blootgesteld onder dat niveau. Bij de definitie van deze grenswaarde in de jaren '80 van de twintigste eeuw werd gemotiveerd aangenomen dat dit operationeel gekozen blootstellingsniveau geen effecten op structuur of functie van een blootgesteld ecosysteem zou inhouden. Dat is in SFT2-onderzoek bevestigd. In feite staat hier, dat bij de classificatie van de waterkwaliteit als ‘groen’ maximaal 1 op 200 soorten door een lokaal mengsel boven de NOEC is blootgesteld.
- (2) De grenswaarden tussen de gele en oranje klassen duiden op blootstellingsniveaus waarbij tussen de 1 op 200 soorten en 1 op 10 soorten een 50%-effectniveau is bereikt. De toxische druk noemen we dan matig, of hoog.
- (3) De rode klasse wordt toegekend als meer dan 10% van de soorten blootgesteld is boven het 50%-effectniveau..



3 Technische handleiding

3.1 Algemeen

De tool wordt gebruikt in een watersysteem-analyse, waardoor inzicht gegeven wordt in de mate waarin stoffen, stofgroepen en mengsels belemmerend werken op de waterkwaliteit (ecologische toestand). Er is dus altijd sprake van (aan de voorkant) invoer van een groot aantal data, het verwerken daarvan door de rekentool, en (aan het eind) het interpreteren van de resultaten in relatie tot het watersysteem. In hoofdstuk 2.1 wordt een voorbeeld gegeven van de samenvatting van de watersysteemanalyse van chemische verontreiniging op een kaart van een gebied. De toxische druk is weergegeven in diverse klassen (kleuren), en de kaart kan verder dingen tonen zoals het landgebruik (diffuse emissies: lokaal en bovenstreams) en de emissie-puntbronnen (in het gebied zelf, bijvoorbeeld Riool Water Zuiverings Installaties, RWZI's). Door landgebruik en puntbronnen te tonen in relatie tot de mengsel-toxische druk wordt inzicht gegeven in de oorzaken en gevolgen van chemische verontreiniging. Dit ondersteunt het nemen van maatregelen.

3.2 Stap 1: Verzamel waterkwaliteitsdata

De invoerdata bestaan uit een aantal typen gegevens:

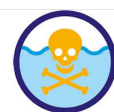
1. Monstergegevens (zoals de xy-coördinaten, tijdstip en dag van monsterneming, etc.)
2. Gegevens over fysisch-chemische eigenschappen van watermonster, die belangrijk zijn om de biologisch beschikbare fractie van de chemische verontreinigingen te kunnen berekenen (zoals de pH voor metalen, en het organisch materiaal voor organische verontreinigingen)
3. Concentratiegegevens van chemische verontreinigingen

De gegevens worden per regel in Excel opgeslagen, waarbij elke regel uiteindelijk de concentratie van één stof is, met de bijhorende fysisch-chemische en locatie-tijd gegevens.

3.3 Stap 2: Formateer de data voor invoer in de rekentool

3.3.1 Het Excelbestand

Het invoerbestand is identiek aan het IHW-format en moet een .csv bestand zijn (zie ook het bijgeleverde voorbeeldbestand op de website van de SFT2). De maximale grootte voor het invoerbestand is 5 mb. Een voorbeeld van een aantal regels is in onderstaande figuur getoond (noot: de eerste regel is als illustratie lichtgeel gemarkeerd, waarbij de verplichte invoer voor de rekentool oranje gemarkeerd is – de file met het *invoerformat* op de website heeft deze kleuren niet):



klopt). Als de CAS code een correcte checksum heeft, maar in zijn geheel (nog) niet in de stoffenlijst voorkomt dan is de foutmelding “stoffen komen niet voor in de stoffenlijst”.

3.3.2 Omgaan met bepalingsgrenzen

Watersystemen worden vaak beoordeeld aan de hand van monitoring van een aantal stoffen die in het systeem zouden kunnen voorkomen, bijvoorbeeld, omdat ze in het verleden zijn aangetroffen, en er maatregelen zijn genomen. Als de maatregelen echter effectief zijn, dan worden de stoffen wel opgenomen in het meetpakket, maar worden er “kleiner-dan” waarden gerapporteerd: de concentraties dalen tot onder de detectielimiet. In deze gevallen kan de rekentool geen lokale toxische druk aanduiden. Dat geldt ook voor waarden “groter dan”.

In sommige onderzoekslijnen wordt in dat soort gevallen gewerkt met de helft van de detectielimiet. Voor de berekening van de toxische druk van een stof *wordt dat nooit gedaan*. De ervaring met een groot aantal veldmonsters heeft aangetoond, dat de toxische druk van een mengsel van bijvoorbeeld 10 of 20 stoffen op deze manier verhoogd kan zijn, tot behoorlijk hoge waarden (vooral voor msPAF-NOEC). Dat zijn, in dat geval, dus uitkomsten die op geen enkele gemeten concentraties zijn gebaseerd.

In de rekentool worden de getallen “<” of “>” om deze redenen niet meegenomen in de bulkberekeningen (vele dataregels met gemeten stoffen) en door de tool er uit gefilterd. Het gevolg hiervan is, dat de uitkomsten de toxische druk vertegenwoordigen van stoffen die gemeten zijn, maar soms ook – als de concentratie op de detectielimiet al een toxische druk zou vertegenwoordigen – dat de toxiciteit kan worden onderschat. Wat de gebruiker van de tool kan doen om deze eventuele bijdrage in te schatten is de detectielimiet van die stoffen invullen, en dan de PAF-waarde daarvan afleiden. Dan wordt het mogelijk om concentraties kleiner dan een detectielimiet om te zetten in een toxische druk die dan eruit ziet als een “PAF < x” waarde (met x dus vaak heel laag), zodat een trendanalyse in de tijd dan wel compleet kan zijn. De toxische druk van vijf opeenvolgende periode met gemeten waarden kunnen leiden tot een bewezen dalende toxische druk van (bijvoorbeeld) PAF-NOEC 15% → 12% → 7% → 4% → <3%, waarbij het laatste getal dus aangeeft dat de toxische druk kleiner is dan 3%.

3.3.3 Omgaan met lage PAF-waarden: ondergrens interpretatie

Zoals geïllustreerd wordt in Figuur 3 zijn de beste schattingen van de toxische druk interpolaties bij de beschikbare ecotoxiciteits-gegevens, ofwel: de X-waarden (gemeten concentraties) kunnen het beste binnen het domein van de ecotoxiciteits-gegevens (laagste en hoogste NOEC-data van soorten die getest zijn) kunnen liggen. Vaak is echter de gemeten concentratie (veel) lager dan laagst gemeten ecotoxiciteits-waarde, waardoor de berekeningen ‘in de lagere staart’ van de gevoeligheidsverdeling liggen. Om te voorkomen dat er daardoor een serie toxische druk getallen, van evenzovele stoffen, meegewogen gaan worden die heel onzeker zijn (behalve dat heel duidelijk is dat ze laag zijn) wordt pragmatisch alleen gerekend met toxische druk-gegevens die een de PAF-waarden van >0,01% vertegenwoordigen. Dat is: meer dan 1 op 100 soorten zou worden aangetast door de stof of het mengsel.

Noot: deze interpretatie-regel voorkomt, dat er een biologische interpretatie gezocht wordt voor de situatie waarin de rekentool voor een monster berekent dat msPAF-EC50 > msPAF-NOEC. Dat kan ecologisch niet, omdat soorten altijd eerst hinder ondervinden (msPAF-NOEC) en dan pas verdwijnen (msPAF-EC50). In schone veldmonsters kunnen hierdoor de ‘lagere staarten’ van de NOEC- en de EC50 modellen elkaar kruisen, zonder dat dit geïnterpreteerd moet worden. Noot: SFT2-rekentool versie 2.0 is hier wat betreft de interpretatie gewijzigd (verbeterd); zie Release Note bij het begin van deze handleiding.



3.3.4 Omgaan met hoedanigheden

De hoedanigheid van een meting kan gecodeerd zijn als 'nf' (na filtratie) of 'zonder filtratie'. Belangrijk is, dat in dat geval geen dubbele meetdata voor een stof worden ingevoerd. Dit komt in oudere data sets regelmatig voor, waardoor bijvoorbeeld metalen twee keer zouden worden ingevoerd (met en zonder filtratie). Waar mogelijk worden alleen gegevens 'na filtratie', gecodeerd met 'nf', gebruikt.

Noot: SFT2-rekentool versie 2.0 is hier wat betreft de berekeningswijze verbeterd; zie Release Note bij het begin van deze handleiding.

3.3.5 Omgaan met extreme waarden

Meetseries kunnen altijd extreme waarden bevatten. Bij het gebruik van de tool kan dit gecontroleerd worden door het evalueren van de data-reeksen per gemeten parameter. Gewoonlijk is er sprake van een gewone spreiding van de waarnemingen, waarbij er logische verschillen bestaan tussen metingen zoals pH of zink of PAKs (vaak gemeten, geen bijzondere emissies van de stof bekend) en bijvoorbeeld bestrijdingsmiddelen (die immers gedurende het groeiseizoen op de toepassingsmomenten een hoge concentratie kunnen geven). Extreme waarden kunnen ook voorkomen bij incidenten. In het kader van de watersysteemanalyse worden de eventuele extreme waardes opgezocht, en wordt geëvalueerd of er een reden is voor de bijzondere waarde. Als er duidelijk sprake is van een fout, dan kan de waarde verwijderd worden. Als er geen fout kan worden ontdekt, kan de waarde gehandhaafd blijven, en kan bij de eind-interpretatie een opmerking gemaakt worden over het effect van de extreme waarde(n). De tool geeft geen waarschuwingen voor extreme waardes en neemt deze mee in de berekening.

3.3.6 Rekening houden met stoffen die van nature voorkomen

De kaderrichtlijn water maakt onderscheid tussen synthetische en niet-synthetische stoffen. De synthetische stoffen zijn allemaal door de mens gemaakt, zodat de natuurlijke toxische druk nihil moet zijn. Stoffen die van nature voor kunnen komen, vormen een aparte categorie. Deze bestaat uit stoffen zoals ammonium, sulfaat, chloride en alle metalen. De toxische druk van deze stoffen kan wel berekend worden, maar de beoordelaar moet altijd grondig nakijken of er sprake is van natuurlijke verhoging van concentraties. Sommige door grondwater beïnvloede watersystemen worden bijvoorbeeld gekenmerkt door hoge ijzer- en mangaanconcentraties, terwijl in brakke wateren de sulfaat- en boriumconcentraties van nature vaak verhoogd zijn. De natuurlijke verhoogde concentraties van deze stoffen kunnen leiden tot toxische effecten op een 'gemiddelde' gemeenschap van soorten leiden, wat hetgeen is dat de 'toxische druk' representeert: de mate van bedreiging voor de gemiddelde soortenverzameling. Als de natuurlijke achtergrondconcentratie verhoogd is, dan zijn de lokale levensgemeenschappen daaraan aangepast, en is er geen sprake van 'toxiciteit waartegen maatregelen moeten worden getroffen'. De soortenverzameling die in die gebieden voorkomt is karakteristiek voor die gebieden (denk aan het zinkviooltje dat op oude zinkertshopen voorkomt). Als menselijk handelen echter tot verhoogde concentraties van deze stoffen heeft geleid is er wel weer sprake van de noodzaak om maatregelen te treffen. De rekentool maakt het op dit moment nog niet mogelijk om op een slimme manier rekening te houden met de natuurlijke achtergrondconcentraties van de natuurlijk voorkomende stoffen. De waterbeheerder moet met deze stoffen dus een extra interpretatiestap inbouwen: het evalueren van de mate waarin de gemeten concentratie door menselijk handelen verhoogd is.

3.3.7 Rekening houden met som-metingen

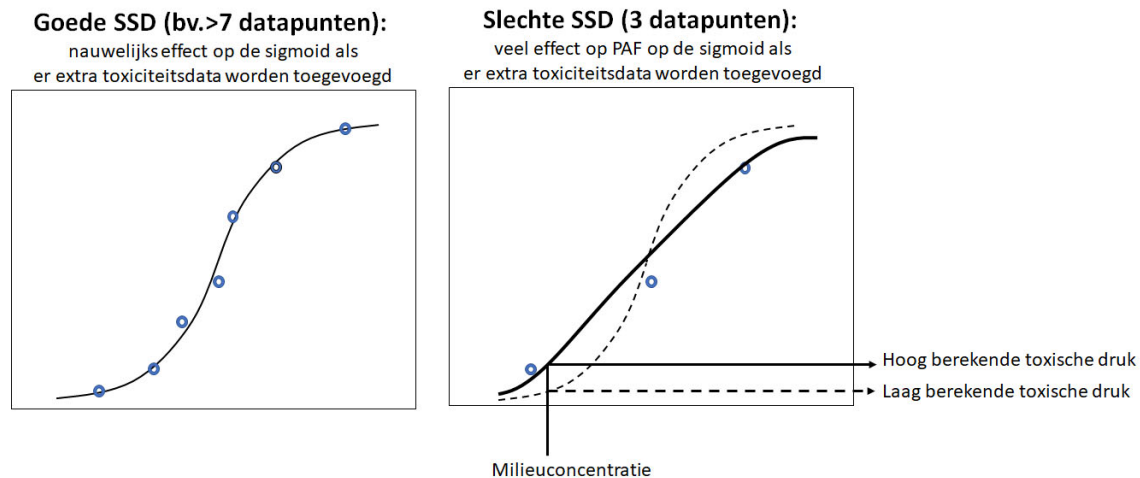
Gemeten concentraties van stoffen kunnen worden samengevat als som-termen, zoals de som van 16 PAKs, of de som van vier 'drins'. Omdat de SSD-modellering altijd per stof werkt, worden de concentraties per stof ingevoerd, wordt per stof de toxische druk berekend, en wordt daarna voor de groep de toxische druk van die groep berekend. Ook hier moet – net als bij hoedanigheden – voorafgaand aan het inlezen van de data opgelet worden dat een stof nooit dubbel geteld wordt. Concentratiegegevens



van een stof worden altijd maar een keer ingevoerd, en dus nooit als losse stof én daarnaast ook als deel van een groep.

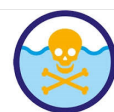
3.3.8 Rekening houden met de kwaliteit van de SSD-modellen

De toxische druk van een stof wordt uiteindelijk afgeleid van de sigmoïdale relatie tussen milieuconcentratie en de Potentieel Aangetaste Fractie soorten, de *Species Sensitivity Distribution* (SSD). Een SSD kan afgeleid zijn van heel veel toxiciteitsdata, of van relatief weinig (Figuur 3). Ook zijn er veel stoffen die nooit getoetst zijn, zodat daar geen SSD van beschikbaar is. In de rekentool wordt gewerkt met stoffen waarvan een goede SSD beschikbaar is.



Figuur 3. Schematische illustratie van goede SSDs en slechtere SSDs. Links: goede SSDs worden afgeleid van een relatief groot aantal toxiciteitsdata van verschillende taxa, en zijn robuust: ze veranderen nauwelijks van ligging en vorm (steilheid) als er een extra toets wordt toegevoegd. Rechts: slechte SSDs kunnen het gevolg zijn van relatief weinig data. In het voorbeeld zijn er slechts drie toxiciteitstesten gedaan. Het lognormale (sigmoïdale) model wordt geschat als de doorgetrokken lijn, en leidt bij een lage concentratie tot een onterecht (door toeval) hoge berekende waarde van de toxische druk. Als er namelijk één toets extra wordt gedaan, zou de lijn bijvoorbeeld gelijk kunnen worden aan de stippellijn, en neemt de toxische druk die bij die 'betere' SSD berekend zou worden sterk af.

De aantallen stoffen waar de rekentool mee rekent zijn weergegeven in Tabel 2.



Tabel 2. Het aantal stoffen waar de rekentool van de SFT2 mee rekent, en het aantal stoffen waar de SSD onvoldoende van is (type C) of ontbreekt (type D), of waarbij er sprake is van stoffen met een natuurlijk voorkomen, zoals Al, Fe, Mn, Si, F, sulfaat, nitraat en natuurlijke toxines zoals microcystine). De kwaliteits-oormerken zijn beschreven in Postma et al. (2021).

Groep	Stoffen (n)	Kwaliteit van de SSD's	Meegenomen in de rekentool
A	215	Hoog	Ja
B	486	Voldoende	Ja
C	534	Matig tot slecht	Nee
D	367	Geen toxiciteitsinformatie	Nee

3.3.9 Rekening houden met variabele blootstelling

Een aquatische levensgemeenschap wordt vaak blootgesteld aan een langdurige belasting vanuit diffuse bronnen, gecombineerd met piekbelastingen zoals die ontstaan door het gebruik van bestrijdingsmiddelen en na hevige regenval (riool-overstorten). In een watersysteemanalyse is er dan sprake van een heel complex beeld van blootstelling, die in ruimte en tijd sterk kan variëren. De berekening van de toxische druk van de cumulatieve blootstelling vindt plaats door een pragmatische, door ecologische overwegingen bepaalde aanpak. Als bijvoorbeeld een kaart moet worden gemaakt van de verschillen in toxische druk in een gebied, dan moeten alle verschillen in blootstellingspatronen worden verwerkt tot het bedoelde inzicht, door metingen over de tijd samen te vatten. Stel dat twee stoffen, door hun toepassing, leiden tot een toxische druk van 50% en 30%. Als ze allebei gelijk worden gebruikt, dan leidt dit tot een mengsel toxische druk van $msPAF=1-(1-0,5)*(1-0,3)=0,65$ (het mengsel leidt tot een toxische druk van 65%). Als de stoffen na elkaar worden toegepast, maar er is nog geen ecologisch herstel, dan leidt dat laatste verschijnsel tot een identieke waarde voor de berekende toxische druk, terwijl er geen gelijktijdige blootstelling aan beide stoffen heeft plaatsgevonden. Met andere woorden: de samenvatting van de toxische druk in een watersysteemanalyse is een samenvatting van de waarschijnlijke gevolgen van alle toxische verschijnselen die in een aquatische levensgemeenschap opgetreden is.

3.4 Stap 3: Controleer decimaaltekens in Excel

De Nederlandse rekentool (versie 2.0) werkt met de Nederlandse instelling van Excel.

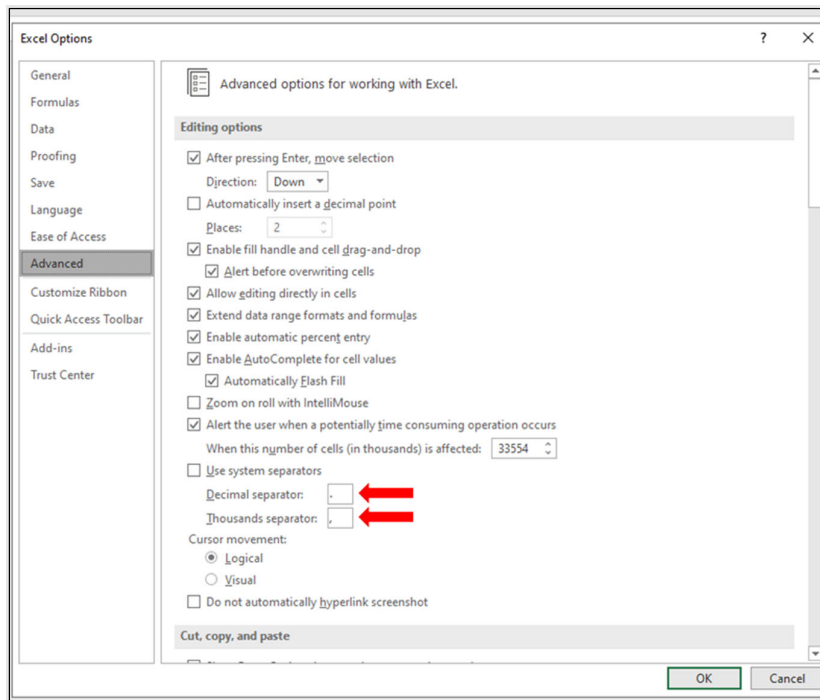
Dit betekent dat de kolommen in het .csv invoerbestand gescheiden moeten worden door een puntkomma (;). Daarnaast moet het decimalen scheidingsteken een komma (,) zijn.

In Excel kan het decimalenteken als volgt aangepast worden: [File > Options > Advanced > Decimal separator] (zie hieronder).

Vergeet niet ook het duizendtal scheidingsteken aan te passen naar een punt (,).

Noot: als de invoergetallen samengevat zijn met de in het Engelstalige gebied gebruikte conventies over het gebruik van decimaaltekens, dan kan de gebruiker simpelweg de Engelstalige versie van de rekentool Versie 2.0 kiezen. Dat kan door de tool te openen, en in het keuzemenu bij "Taal/Language" te kiezen voor "English").



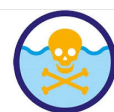


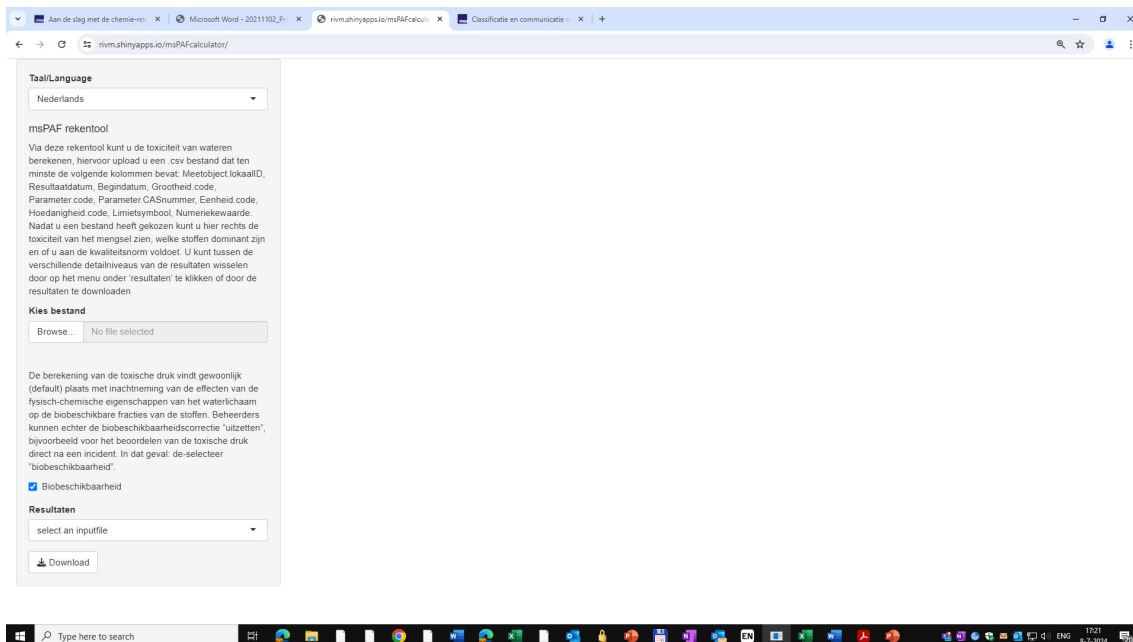
3.5 Stap 4: Starten van de tool

De rekentool wordt gestart vanuit de webpagina:

<https://www.sleutelfactortoxiciteit.nl/verdieping/werken-met-het-chemiespoor/aan-de-slag-met-de-chemie-rekentool>

Als het goed gaat verschijnt de volgende pagina:





3.6 Stap 5: Landingspagina en knoppen

De rekentool toont vijf keuzes (zie figuur hierboven):

1. Taal/Language – kies hier *Nederlands* of *English*; hier wordt de keuze van de invoerfile/taal en daardoor impliciet het gebruik van decimaalteken bepaald.
2. Kies bestand – *Browse*; hier wordt een invoerfile gekozen (de klaargemaakte Excel file). Gebruik de voorbeeldfile op de webpagina als *format* om de eigen data op de goede wijze op te slaan.
3. Biobeschikbaarheid – deze knop is nieuw in Versie 2.0; hier kan gekozen worden voor kwantificeren van de toxische druk (PAF en msPAF) via de *default*-aanpak, waarbij de rekentool de biobeschikbare concentraties van de aanwezige stoffen gebruikt om de toxische druk te bepalen. Het vakje is in dit geval aangevinkt. Als alternatief kan, voor speciale analyses, de toxische druk zonder biobeschikbaarheids-analyse worden uitgevoerd. Een waterbeheerder kan bijvoorbeeld bij een incident de toxische druk van de plotseling vrijgekomen stoffen willen bepalen: in dit geval zijn de stoffen direct na de emissie nog volledig beschikbaar.
4. Resultaten – *Select an inputfile* wordt getoond als er nog geen invoergegevens bewerkt zijn; zodra u een bestand geüpload heeft kunt u hier kiezen uit de volgende tabbladen:
 - a. Warnings: mogelijke problemen in de invoerfile worden samengevat
 - b. PAFtable: de toxische druk van elke stof per monster wordt getoond
 - c. msPAFacute: de toxische druk (msPAF-EC50¹) wordt getoond voor een aantal stofgroepen, en voor het totale mengsel (als klassen samengevat)

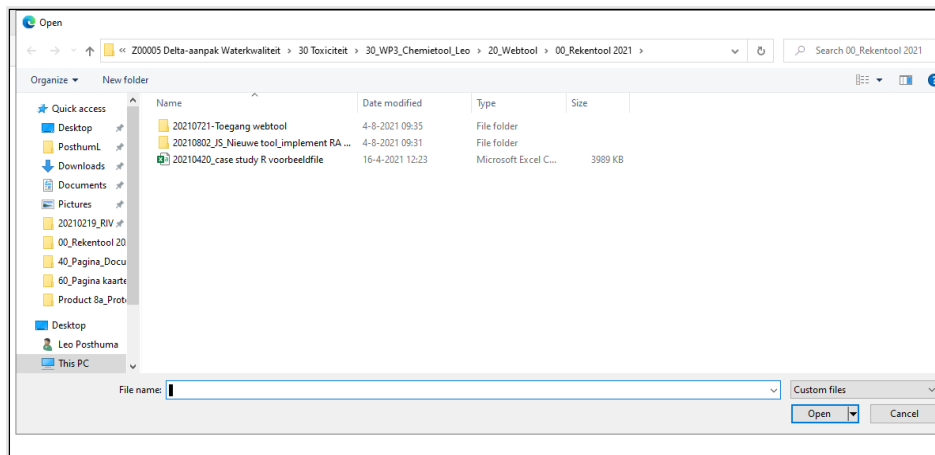
¹ Dit is de toxische druk die bij verhoging betekent dat er soortenverlies optreedt; deze msPAF-EC50 waarden worden gebruikt om het watermonster in te delen in de klassen 'geel', 'oranje' of 'rood'.



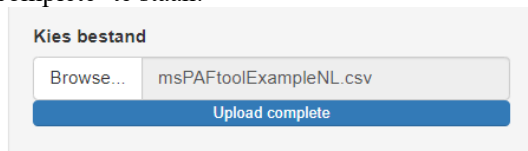
- d. msPAFchronic: de toxische druk (msPAF-NOEC²) wordt getoond voor een aantal stofgroepen, en voor het totale mengsel (als klassen samengevat)
 - e. msPAFqualitative: de toxische druk samengevat als kwalitatieve score zoals ook in tabel 1 is aangegeven.
5. Download; hier worden de resultaten van de berekeningen geëxporteerd naar een Excel bestand.

3.7 Stap 6: Lees de invoerdata in

De 'Browse' knop onder *Kies bestand* is de knop om het invoer bestand te selecteren. Wanneer op deze knop gedrukt wordt verschijnt een pop-up scherm waar u het invoerbestand kunt selecteren (zie hieronder). Kies het invoerbestand waarmee de analyses gedaan moeten worden.



Wanneer het invoerbestand succesvol ingeladen is komt onder de 'Browse' knop de tekst: "Upload complete" te staan:



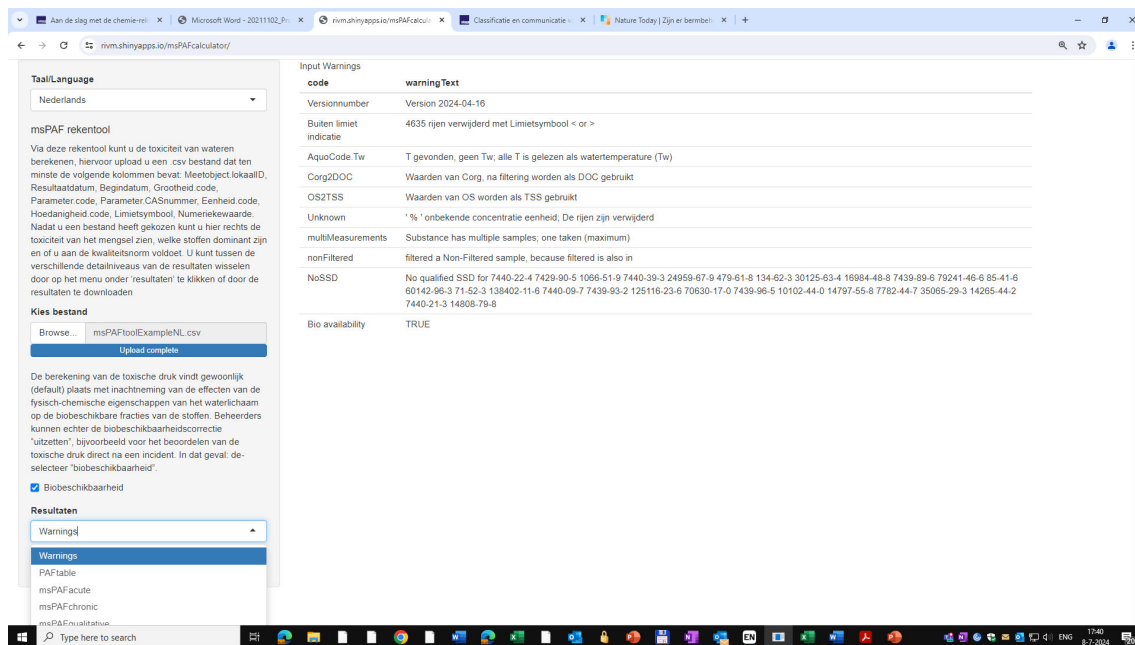
3.8 Stap 7: Evalueer de waarschuwingen en los invoerproblemen op

Nadat het bestand succesvol is ingelezen verandert 'Select an inputfile' onder Resultaten in 'Warnings' en verschijnen rechts in het scherm de opmerkingen die bij het inlezen van de meetgegevens naar boven zijn gekomen.

De belangrijkste stap die nu gedaan wordt is het controleren van de waarschuwingen, en het oplossen van eventuele invoerproblemen. De gebruiker neemt de waarschuwingen door, en lost de gesignaleerde waarschuwingen zo mogelijk op:

² Dit is de toxische druk die bij verhoging betekent dat er soorten gehinderd worden (zij worden blootgesteld boven hun geen-effect niveau); deze msPAF-NOEC waarden worden gebruikt om het watermonster in te delen in de klassen 'blauw' en 'groen'.

- Dat kan wel als er bijvoorbeeld een stof met CAS-code wordt aangetroffen die niet bestaat (“Illegal CAS 7440-09-07”; er kan sprake zijn van een typefout, die hersteld kan worden).
- Dat kan niet als er niet gerekend kan worden, zoals vanwege "<"-waarden voor de concentratie van een stof.



code	warningText
Versionnummer	Version 2024-04-16
Buiten limiet indicatie	4635 rijen verwijderd met Limietsymbool < or >
AquoCode.Tw	T gevonden, geen Tw; alle T is gelezen als watertemperature (Tw)
Corg2DOC	Waarden van Corg, na filtering worden als DOC gebruikt
OS2TSS	Waarden van OS worden als TSS gebruikt
Unknown	'%' onbekende concentratie eenheid; De rijen zijn verwijderd
multiMeasurements	Substance has multiple samples; one taken (maximum)
nonFiltered	filtered a Non-Filtered sample, because filtered is also in
NoSSD	No qualified SSD for 7440-22-4 7429-90-5 1096-51-9 7440-39-3 24959-67-9 479-61-8 134-62-3 30125-63-4 16984-46-8 7439-89-6 79241-46-6 85-41-6 60142-96-3 71-52-3 138402-11-6 7440-09-7 7439-93-2 125116-23-6 70630-17-0 7439-96-5 10102-44-0 14797-55-8 7782-44-7 35055-29-3 14265-44-2 7440-21-3 14808-79-8
Bio availability	TRUE

Het bovenstaande voorbeeld geeft een aantal foutmeldingen, maar desondanks kan de tool wel gerund worden. Dit is te controleren door de *PAF* tabel of *msPAFacute* of *msPAFchronic* tabellen te selecteren onder ‘Resultaten’.

Indien er een outputtabel gegenereerd wordt, dan is de modelrun succesvol. Zo niet, dan moet gekeken worden welke data aangevuld moet worden aan de hand van de tekst onder ‘warningText’. Wanneer de benodigde data is aangevuld in het invoerbestand kan de tool opnieuw gerund worden. Dit doet u door het gecorrigeerde .csv bestand opnieuw te uploaden.

3.9 Stap 8: Evalueer op het scherm de toxische druk uitvoer

Door bij ‘Resultaten’ uit de overige knoppen te kiezen wordt rechts op het scherm de uitvoer die berekend wordt getoond. Het betreft achtereenvolgens de verschillende manieren om via het scherm alvast inzicht te krijgen in de toxische druk. Alle gegevens die op de achtereenvolgende schermen getoond worden kunnen ook worden geëxporteerd. De geëxporteerde gegevens zijn gelijk aan de gegevens op het scherm, maar ze worden samengevat in één Excel-file met diverse tab-bladen.

3.9.1 PAFtable

Door het indrukken van de PAFtable-knop wordt rechts in beeld een serie uitvoergegevens getoond:



TaskLanguage: Nederlands

msPAF rekenool

Via deze rekenool kunt u de toxiciteit van wateren berekenen. Hiervoor uploadt u een .csv bestand op het moment de volgende kolommen bereid: Meetobject, LokaalID, Resultaatdatum, Begindatum, Groetheid code, Parameter code, Parameter CASnummer, Gebruik code, Meetmethode code, Limietwaarde, Herkomstcode. Nadat u een bestand heeft gekozen kunt u hier rechts de toxiciteit van het mengsel zien. Verke stoffen dominant zijn en of u aan de kwaliteitnorm voldoet. U kunt kiezen de resultante detailniveau van de resultaten wisselen door op het menu onder 'resultaten' te klikken of door de resultaten te downloaden

Kies bevans

Bevans: msPAFToolExampleNL.csv

Upload contents

De berekening van de toxische druk vindt gewoontelijk (default) plaats met inachtneming van de effecten van de fysisch-chemische eigenschappen van het waterlichaam op de biobeschikbare fracties van de stoffen. Beheerders kunnen echter de biobeschikbaarheidscoëfficiënt 'vactoren' bijvoeren voor het bepalen van de toxische druk direct na een incident. In dat geval: de-selector 'biobeschikbaarheid'

Resultaten

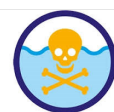
PAFtabel

Download

PAF values	CAS	ChemCode	UseClass	MeasuredValue	ActConc	HU_acute	HU_Chronic	PAFacute	PAFchronic	groep.fotoNL	PrimaryMoA	SampleID	TooLowAcute	TooLowChronic	Avg10Log_acute	Dev10L
	95-47-6	12zijn	Industriël	0.30	0.30	0.00	0.00	0.00	0.00	OverigOrg	non polar narcosis	'0037'-25-5-2019	< 1e-04	< 1e-04		4.04
	94-75-7	24D	Pesticide	88.00	88.00	0.00	0.02	0.00	0.05	bestrijdingsmiddel	phenoxycetic	'0099'-30-4-2019				4.71
	194-40-5	4CtyFal	Household	0.12	0.12	0.00	0.01	0.00	0.00	OverigOrg	Polar Narcosis	'0079'-29-4-2019				2.29
	93-32-9	Actie	Industriël	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	PAKs	non polar narcosis	'0005'-1-4-2019	< 1e-04	< 1e-04		2.96
	93-32-9	Actie	Industriël	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	PAKs	non polar narcosis	'0005'-27-4-2019	< 1e-04	< 1e-04		2.96
	93-32-9	Actie	Industriël	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	PAKs	non polar narcosis	'0005'-30-4-2019	< 1e-04	< 1e-04		2.96
	93-32-9	Actie	Industriël	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	PAKs	non polar narcosis	'0010'-1-4-2019	< 1e-04	< 1e-04		2.96
	93-32-9	Actie	Industriël	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	PAKs	non polar narcosis	'0010'-27-5-2019	< 1e-04	< 1e-04		2.96
	93-32-9	Actie	Industriël	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	PAKs	non polar narcosis	'0010'-30-4-2019	< 1e-04	< 1e-04		2.96
	93-32-9	Actie	Industriël	1.00	1.00	0.00	0.01	0.00	0.00	PAKs	non polar narcosis	'0027'-2-4-2019				2.96
	93-32-9	Actie	Industriël	1.00	1.00	0.00	0.01	0.00	0.00	PAKs	non polar narcosis	'0037'-25-5-2019				2.96
	93-32-9	Actie	Industriël	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	PAKs	non polar narcosis	'0037'-30-4-2019	< 1e-04	< 1e-04		2.96
	93-32-9	Actie	Industriël	1.00	1.00	0.00	0.01	0.00	0.00	PAKs	non polar narcosis	'0034'-25-5-2019				2.96

De uitvoerkolommen zijn een samenvatting van de invoergegevens, zodat die gecontroleerd kunnen worden, en geven inzicht in de toxische druk per stof, zoals acuut (zou de concentratie van deze stof tot soortenverlies leiden) en chronisch (zou de concentratie van deze stof tot hinder leiden). De samengevatte kolommen hebben de volgende betekenis:

- CAS** De identificatie van de chemische verontreiniging met de CAS (Chemical Abstracts Services) standaard
- ChemCode** De identificatie van de chemische verontreiniging met de Aquocode standaard
- UseClass** Indeling van de gemeten stoffen in stofgroepen aan de hand van toepassingen en typen bronnen (zoals: industrieel, pesticide, verbranding, etc.)
- MeasuredValue** De gemeten concentratie, als ingevoerd datapunt
- ActConc** De berekende biobeschikbare concentratie
- HU_acute** De Hazard Unit (HU), berekend als concentratie in het monster gedeeld door de Avg10Log_acute, zodat getallen $HU > 1$ aangeven, dat de gemiddelde soort boven het EC50-niveau wordt blootgesteld (en er dus sprake is van verontreiniging met effecten op dat niveau, voor de gemiddeld-gevoelige soort)
- HU_Chronic** De Hazard Unit (HU), berekend als concentratie in het monster gedeeld door de Avg10Log_chronic, zodat getallen $HU > 1$ aangeven, dat de gemiddelde soort boven het NOEC-niveau wordt blootgesteld (en er dus sprake is van verontreiniging met effecten op dat niveau, voor de gemiddeld-gevoelige soort)
- PAFacute** Omrekening van de HU_Acute naar de fractie soorten die boven hun EC50-niveau zijn blootgesteld, waarbij verhoogde waarden duiden op verhoogde belemmeringen t.a.v. de ecologische status (basis voor indeling in "geel", "oranje" of "rood").
- PAFchronic** Omrekening van de HU_Acute naar de fractie soorten die boven hun NOEC-niveau zijn blootgesteld, waarbij verhoogde waarden duiden op verhoogde belemmeringen zoals het begin van effecten op groei of reproductie ('hinder'), en basis voor indeling in 'blauw' of 'groen'.
- groep.fotoNL** Indeling van de stoffen in vijf groepen, te weten: metalen, bestrijdingsmiddelen, PAKs, overige organische contaminanten en NH3 (zie (Postma et al., 2021))
- PrimaryMoA** Groepering van de stof naar werkingsmechanisme (hier is nummer-code; stoffen met eenzelfde werkingsmechanisme hebben dezelfde code)
- SampleID** De combinatie van Meetobject.LokaalID en Begindatum die het Sample identificeert, hier "locatie "0005" en monstertijdstip ("2019-04-01")
- TooLowAcute** Gewijzigd in Versie 2.0 van de rekenool. Aanduiding van lage PAF-waarde die niet verder meegenomen wordt in de interpretatie. Zie Release Note versie 2.0.
- TooLowChronic** Gewijzigd in Versie 2.0 van de rekenool. Aanduiding van lage PAF-waarde die niet verder meegenomen wordt in de interpretatie. Zie Release Note versie 2.0.

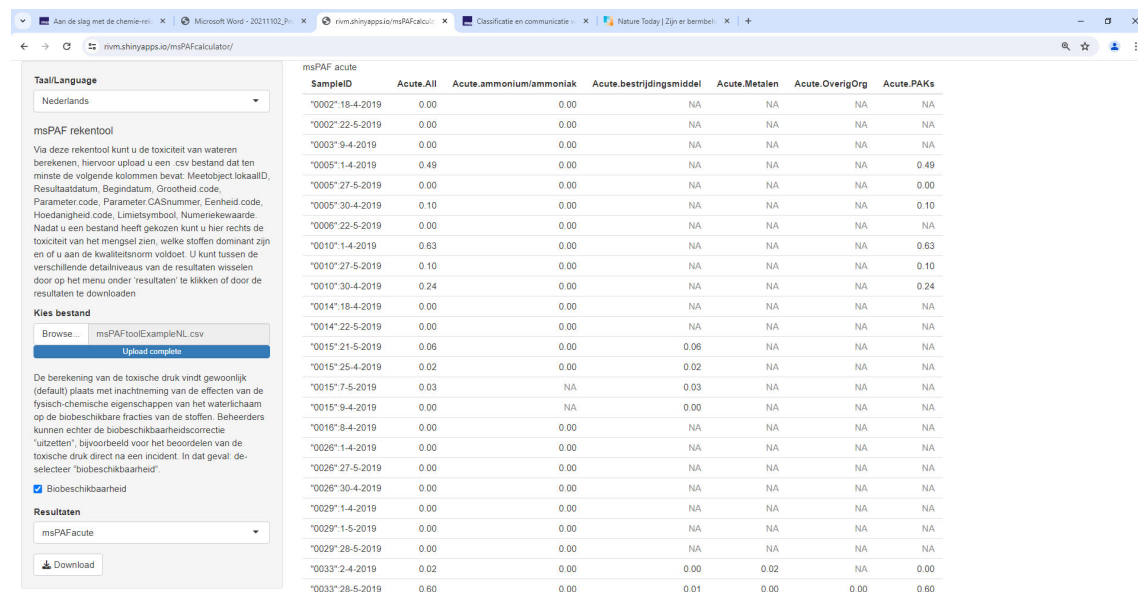


- Avg10Log_acute Gemiddelde van de log-getransformeerde EC50-gegevens van toetsen met de stof met verschillende organismen (middenpunt van de sigmoïdale SSD-EC50)
- Dev10Log_acute Standaarddeviatie van de log-getransformeerde EC50-gegevens van toetsen met de stof met verschillende organismen (helling van de sigmoïdale SSD-EC50 op het middelpunt)
- Avg10Log_chronic Gemiddelde van de log-getransformeerde NOEC-gegevens van toetsen met de stof met verschillende organismen (middenpunt van de sigmoïdale SSD-EC50)
- Dev10Log_chronic Standaarddeviatie van de log-getransformeerde NOEC-gegevens van toetsen met de stof met verschillende organismen (helling van de sigmoïdale SSD-EC50 op het middelpunt).

Noot: houd rekening met de keuze bij de knop “biobeschikbaarheid” en vermeld bij rapportages of de resultaten berekend zijn met correctie voor biobeschikbaarheid (de *default* instelling voor een watersysteemanalyse) of zonder die correctie (zoals bijvoorbeeld bij incidenten gebruikt kan worden).

3.9.2 msPAFacute

Door het indrukken van de msPAFacute-knop wordt rechts in beeld een serie uitvoergegevens getoond:



SampleID	Acute.All	Acute.ammonium/ammoniak	Acute.bestrijdingsmiddel	Acute.Metalen	Acute.OverigOrg	Acute.PAKs
*0002*18-4-2019	0.00	0.00	NA	NA	NA	NA
*0002*22-5-2019	0.00	0.00	NA	NA	NA	NA
*0003*9-4-2019	0.00	0.00	NA	NA	NA	NA
*0005*1-4-2019	0.49	0.00	NA	NA	NA	0.49
*0005*27-5-2019	0.00	0.00	NA	NA	NA	0.00
*0005*30-4-2019	0.10	0.00	NA	NA	NA	0.10
*0006*22-5-2019	0.00	0.00	NA	NA	NA	NA
*0010*1-4-2019	0.63	0.00	NA	NA	NA	0.63
*0010*27-5-2019	0.10	0.00	NA	NA	NA	0.10
*0010*30-4-2019	0.24	0.00	NA	NA	NA	0.24
*0014*18-4-2019	0.00	0.00	NA	NA	NA	NA
*0014*22-5-2019	0.00	0.00	NA	NA	NA	NA
*0015*21-5-2019	0.06	0.00	0.06	NA	NA	NA
*0015*25-4-2019	0.02	0.00	0.02	NA	NA	NA
*0015*7-5-2019	0.03	NA	0.03	NA	NA	NA
*0015*9-4-2019	0.00	NA	0.00	NA	NA	NA
*0016*8-4-2019	0.00	0.00	NA	NA	NA	NA
*0026*1-4-2019	0.00	0.00	NA	NA	NA	NA
*0026*27-5-2019	0.00	0.00	NA	NA	NA	NA
*0026*30-4-2019	0.00	0.00	NA	NA	NA	NA
*0029*1-4-2019	0.00	0.00	NA	NA	NA	NA
*0029*1-5-2019	0.00	0.00	NA	NA	NA	NA
*0029*28-5-2019	0.00	0.00	NA	NA	NA	NA
*0033*2-4-2019	0.02	0.00	0.00	0.02	NA	0.00
*0033*28-5-2019	0.60	0.00	0.01	0.00	0.00	0.60

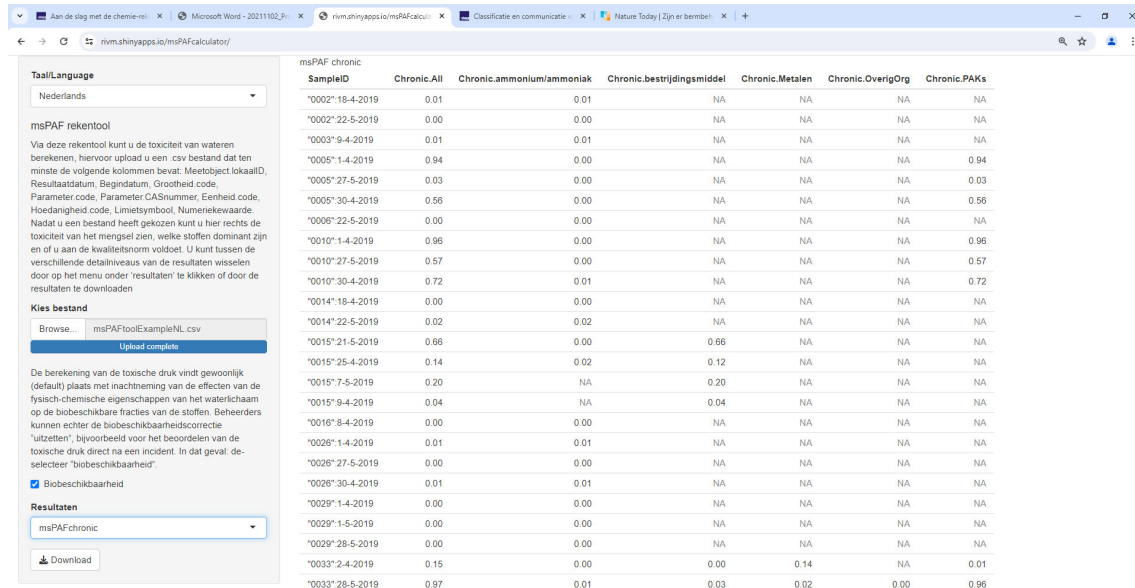
- SampleID De combinatie van Meetobject.LokaalID en Begindatum die het sample identificeren; een msPAF waarde wordt berekend per sample
- Acute.All msPAF-EC50 van alle stoffen die in het monster zijn gemeten
- Acute.ammonium/ammoniak msPAF-EC50 van alleen ammoniak (gebaseerd op metingen van ammonium en/of ammoniak, waarbij de toxische druk is afgeleid van de meest toxische stof, ammoniak)
- Acute.bestrijdingsmiddel msPAF-EC50 van alleen de bestrijdingsmiddelen
- Acute.Metalen msPAF-EC50 van alleen de metalen
- Acute.OverigOrg msPAF-EC50 van alleen de overige organische verontreinigingen (niet-PAKs en niet-bestrijdingsmiddelen)
- Acute.PAKs msPAF-EC50 van alleen de PAKs

Door de onderverdeling in stofgroepen kan vastgesteld worden welke stofgroep in het monster het sterkst bijdraagt aan effecten.

Noot: houd rekening met de keuze bij de knop “biobeschikbaarheid” en vermeld bij rapportages of de resultaten berekend zijn met correctie voor biobeschikbaarheid (de *default* instelling voor een watersysteemanalyse) of zonder die correctie (zoals bijvoorbeeld bij incidenten gebruikt kan worden).

3.9.3 msPAFchronic

Door het indrukken van de msPAFchronic-knop wordt rechts in beeld een serie uitvoergegevens getoond:

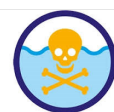


SampleID	Chronic.All	Chronic.ammonium/ammoniak	Chronic.bestrijdingsmiddel	Chronic.Metalen	Chronic.OverigOrg	Chronic.PAKs
*0002*18-4-2019	0.01	0.01	NA	NA	NA	NA
*0002*22-5-2019	0.00	0.00	NA	NA	NA	NA
*0003*9-4-2019	0.01	0.01	NA	NA	NA	NA
*0005*1-4-2019	0.94	0.00	NA	NA	NA	0.94
*0005*27-5-2019	0.03	0.00	NA	NA	NA	0.03
*0005*30-4-2019	0.56	0.00	NA	NA	NA	0.56
*0006*22-5-2019	0.00	0.00	NA	NA	NA	NA
*0010*1-4-2019	0.96	0.00	NA	NA	NA	0.96
*0010*27-5-2019	0.57	0.00	NA	NA	NA	0.57
*0010*30-4-2019	0.72	0.01	NA	NA	NA	0.72
*0014*18-4-2019	0.00	0.00	NA	NA	NA	NA
*0014*22-5-2019	0.02	0.02	NA	NA	NA	NA
*0015*21-5-2019	0.66	0.00	0.66	NA	NA	NA
*0015*25-4-2019	0.14	0.02	0.12	NA	NA	NA
*0015*7-5-2019	0.20	NA	0.20	NA	NA	NA
*0015*9-4-2019	0.04	NA	0.04	NA	NA	NA
*0016*8-4-2019	0.00	0.00	NA	NA	NA	NA
*0026*1-4-2019	0.01	0.01	NA	NA	NA	NA
*0026*27-5-2019	0.00	0.00	NA	NA	NA	NA
*0026*30-4-2019	0.01	0.01	NA	NA	NA	NA
*0029*1-4-2019	0.00	0.00	NA	NA	NA	NA
*0029*1-5-2019	0.00	0.00	NA	NA	NA	NA
*0029*28-5-2019	0.00	0.00	NA	NA	NA	NA
*0033*2-4-2019	0.15	0.00	0.00	0.14	NA	0.01
*0033*28-5-2019	0.97	0.01	0.03	0.02	0.00	0.96

SampleID	De combinatie van Meetobject.LokaalID en Begindatum die het sample identificeren; een msPAF waarde wordt berekend per sample
Chronic.All	msPAF-NOEC van alle stoffen die in het monster zijn gemeten
Chronic.ammonium/ammoniak	msPAF-NOEC van alleen ammoniak (gebaseerd op metingen van ammonium en/of ammoniak, waarbij de toxische druk is afgeleid van de meest toxische stof, ammoniak)
Chronic.bestrijdingsmiddel	msPAF-NOEC van alleen de bestrijdingsmiddelen
Chronic.Metalen	msPAF-NOEC van alleen de metalen
Chronic.OverigOrg	msPAF-NOEC van alleen de overige organische verontreinigingen (niet-PAKs en niet-bestrijdingsmiddelen)
Chronic.PAKs	msPAF-NOEC van alleen de PAKs

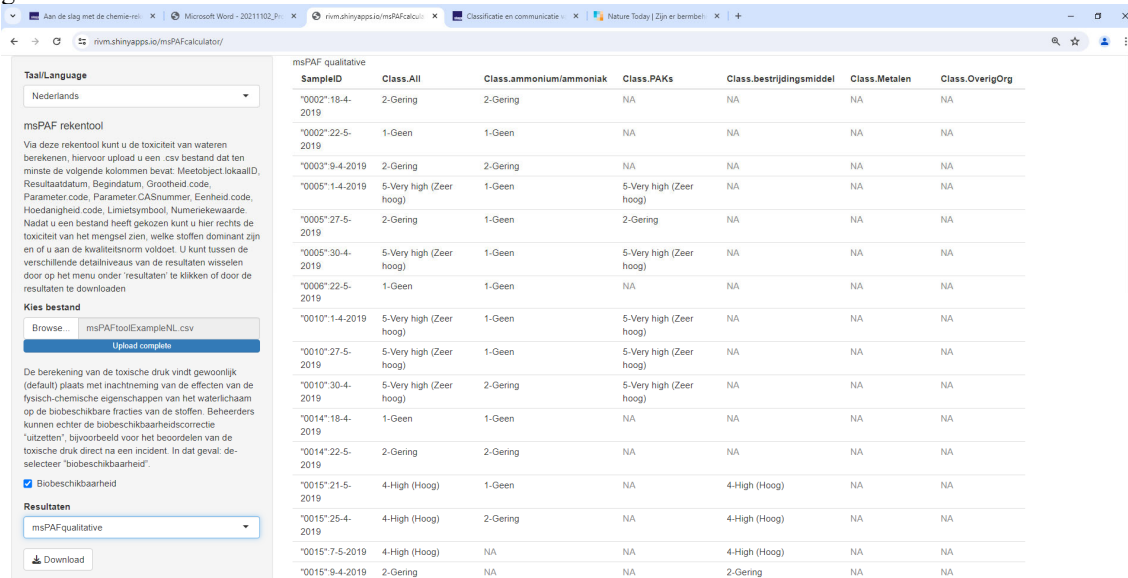
Door de onderverdeling in stofgroepen kan vastgesteld worden welke stofgroep in het monster het sterkst bijdraagt aan effecten.

Noot: houd rekening met de keuze bij de knop “biobeschikbaarheid” en vermeld bij rapportages of de resultaten berekend zijn met correctie voor biobeschikbaarheid (de *default* instelling voor een watersysteemanalyse) of zonder die correctie (zoals bijvoorbeeld bij incidenten gebruikt kan worden).



3.9.4 msPAFqualitative

Door het indrukken van de msPAFqualitative-knop wordt rechts in beeld een serie uitvoergegevens getoond:



SampleID	Class.All	Class.ammonium/ammoniak	Class.PAKs	Class.bestrijdingsmiddel	Class.Metalen	Class.OverigOrg
*0002*18-4-2019	2-Gering	2-Gering	NA	NA	NA	NA
*0002*22-5-2019	1-Geen	1-Geen	NA	NA	NA	NA
*0003*9-4-2019	2-Gering	2-Gering	NA	NA	NA	NA
*0005*1-4-2019	5-Very high (Zeer hoog)	1-Geen	5-Very high (Zeer hoog)	NA	NA	NA
*0005*27-5-2019	2-Gering	1-Geen	2-Gering	NA	NA	NA
*0005*30-4-2019	5-Very high (Zeer hoog)	1-Geen	5-Very high (Zeer hoog)	NA	NA	NA
*0006*22-5-2019	1-Geen	1-Geen	NA	NA	NA	NA
*0010*1-4-2019	5-Very high (Zeer hoog)	1-Geen	5-Very high (Zeer hoog)	NA	NA	NA
*0010*27-5-2019	5-Very high (Zeer hoog)	1-Geen	5-Very high (Zeer hoog)	NA	NA	NA
*0010*30-4-2019	5-Very high (Zeer hoog)	2-Gering	5-Very high (Zeer hoog)	NA	NA	NA
*0014*18-4-2019	1-Geen	1-Geen	NA	NA	NA	NA
*0014*22-5-2019	2-Gering	2-Gering	NA	NA	NA	NA
*0015*21-5-2019	4-High (Hoog)	1-Geen	NA	4-High (Hoog)	NA	NA
*0015*25-4-2019	4-High (Hoog)	2-Gering	NA	4-High (Hoog)	NA	NA
*0015*7-5-2019	4-High (Hoog)	NA	NA	4-High (Hoog)	NA	NA
*0015*9-4-2019	2-Gering	NA	NA	2-Gering	NA	NA

SampleID

De combinatie van Meetobject.LokaalID en Begindatum die het sample identificeren; een msPAF waarde wordt berekend per sample

Class.All

De classificatie van de toxische druk van alle stoffen samen

Class.ammonium/ammoniak

De classificatie van de toxische druk van ammoniak

Class.PAKs

De classificatie van de toxische druk van alle PAKs

Class.bestrijdingsmiddelen

De classificatie van de toxische druk van alle bestrijdingsmiddelen

Class.Metalen

De classificatie van de toxische druk van alle metalen

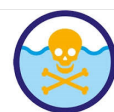
Class.OverigOrg

De classificatie van de toxische druk van organische stoffen die niet ingedeeld zijn bij de bovenstaande groepen

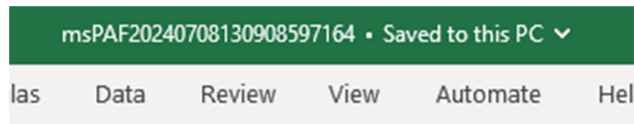
Noot: houd rekening met de keuze bij de knop “biobeschikbaarheid” en vermeld bij rapportages of de resultaten berekend zijn met correctie voor biobeschikbaarheid (de *default* instelling voor een watersysteemanalyse) of zonder die correctie (zoals bijvoorbeeld bij incidenten gebruikt kan worden).

3.10 Stap 9: Exporteer de toxische druk uitvoer

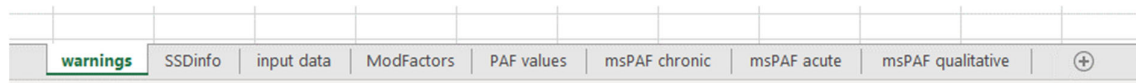
Door middel van het drukken op de ‘Download’ wordt de gehele berekening geëxporteerd naar Excel. Daar worden verdere databewerkingen gedaan.

De Excel-file heeft een unieke naam, die gebaseerd is op 'msPAF-dag/tijd.xlsx' identificatie (zoal hier een export in het jaar 2024, op 8 juli (20210823) om 13:09 uur:



Er wordt in iedere Excel-export een aantal Tabbladen geproduceerd:

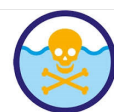


- De 'Warnings' zoals eerder in de webtool weergegeven worden herhaald
- De SSD-info vermeldt de gebruikte *Species Sensitivity Distributions* (SSD) informatie (dit zijn de modellen die de ecotoxiciteit van een stof samenvatten, in de sigmoïdale relatie tussen concentratie op de X-as en potentieel aangetaste fractie soorten op de Y-as:

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
AquoCode	CAS	LeenSSD	SSDquality	stofgroep	log10AvgAcu	log10AvgChr	Devlog10Acu	Devlog10Chronic	
BaP	50-32-8		A	PAKs	1.48	0.5181	0.702	0.7024	
DBahAnt	53-70-3		B	PAKs	0.0374	-0.9626	0.702	0.7024	
BaA	56-55-3		B	PAKs	0.615	-0.3853	0.702	0.7024	
AcNe	83-32-9		B	PAKs	2.96	1.9562	0.439	0.7024	
Fen	85-01-8		B	PAKs	2.67	2.1159	0.45	0.7024	
Fle	86-73-7		B	PAKs	3.38	2.3823	0.782	0.7024	
Naf	91-20-3		A	PAKs	3.62	3.1729	0.484	0.7024	
MCPA	94-74-6		A	bestrijdingsr	4.46	3.8786	1.11	0.8392	
24D	94-75-7		A	bestrijdingsr	4.71	3.649	0.93	1.0408	
12xyIn	95-47-6		B	OverigOrg	4.04	3.035	0.622	0.7024	
C2yBen	100-41-4		A	OverigOrg	4.24	3.2319	0.714	0.7024	

- o AquoCode: de Aquocode van de stof
- o CAS: het CAS-nummer van de stof
- o Leen-SSD: soms is er geen SSD van een stof, maar wel van een vrijwel identieke stof. In die gevallen wordt deze 'leen-SSD' gebruikt voor het afleiden van de toxische druk van de gemeten stof; in die gevallen staat hier de naam van de 'leen-stof'
- o SSDquality: de toxische druk wordt alleen bepaald als de SSD van goede kwaliteit is. Dit is weergegeven met de codes A en B (zeer goede en goede SSDs), C (matige SSD, kan onverwacht hoge PAF-waarden opleveren) en D (geen SSD beschikbaar).
- o Log10AvgAcute, idem Chronic, en idem StDev's: zie boven (de parameters van de SSD-EC50 en de SSD-NOEC)
- De sheet 'Input data' toont een copie van de ingevoerde data, waarbij de rekentool alle eenheden geharmoniseerd heeft; de gebruiker kan hier controleren of alle invoerdata echt goed zijn overgenomen
- PAFvalues: zoals omschreven, bij de knop ViewSelect
- msPAF chronic: zoals omschreven, bij de knop ViewSelect
- msPAF acute: zoals omschreven, bij de knop ViewSelect.
- msPAF qualitative: zoals omschreven, bij de knop ViewSelect

Noot: Controleer altijd of uw ruwe invoer en de geharmoniseerde invoer in het tabblad - 'Input data' - overeenkomen.



De PAFtable toont voor alle plaats/tijd monstercodes die zijn ingevoerd (elke regel) de berekende waarden van de toxische druk (van elke stof, zowel acuut als chronisch).

De msPAFacute toont voor alle plaats/tijd monstercodes de mengsel toxische druk onder de modellering "acute", waarbij de getallen inzicht geven in de fractie soorten die ernstig zou worden aangetast (EC50-niveau), en waarbij deze waarden gepresenteerd (samengevat) worden als de kleuren geel, oranje en rood.

De msPAFchronic toont voor alle plaats/tijd monstercodes de mengsel toxische druk onder de modellering "chronic", waarbij de getallen inzicht geven in de fractie soorten die hinder ondervinden (blootstelling boven hun geen-effect niveau, NOEC), en waarbij deze waarden gepresenteerd (samengevat) worden als de kleuren blauw en groen.

De msPAFqualitative toont voor alle plaats/tijd monstercodes de mengsel toxische druk kwalitatief uitgedrukt. Hierin worden de volgende niveaus onderscheiden: Geen, Gering, Matig, Hoog en Zeer Hoog. Deze klassen van chemische verontreiniging en hun relatie met de ecologische toestand worden uitgelegd in Tabel 1.



4 Van uitvoergegevens naar interpretatie voor de KRW-doelen

4.1 Van ruwe data naar goede samenvatting van resultaten

De uitvoer geeft waarden van de toxische druk per plaats/tijd per stof (met waarden voor ‘acuut’ in relatie tot de indeling geel/oranje/rood, en ‘chronisch’ in relatie tot blauw en groen en waardeert de waterkwaliteit van goed tot slecht (zie 2.4)). Elk monster (regel) kan hierdoor aan het eind van de berekeningen ingedeeld worden in één chemische verontreinigingsklasse: blauw, groen, geel, oranje of rood. Die gegevens kunnen op een kaart geplotted worden, per stof, per stofgroep of voor de totale toxische druk. Bij hogere verontreiniging geven de msPAF-tabellen, en uiteindelijk de PAF-tabel, inzicht in de stofgroepen resp. de stoffen die sterk bijdragen in een lokaal mengsel.

De doelen van de watersysteemanalyse, en de gemeten stoffen, zijn vaak echter niet 1:1 gerelateerd, of anders gezegd: compleet. De stoffen die gemonitord worden hoeven niet compleet te zijn, zoals beschreven is in Paragraaf 2.2 “Representativiteit: lokaal voorkomende stoffen beoordelen”. Ook kunnen ze, vanwege de kosten van de monitoring, in cycli verzameld worden – met jaren met een compleet stoffenpakket afgewisseld met jaren met een beperkt pakket. Als er niet, of niet continu, sprake is van niet-representatieve stoffenpakketten, zijn er doelgerichte data-analyse stappen nodig om de gegevens goed samen te vatten.

Bijvoorbeeld: als er in zes jaar en afwisseling is van een groot-klein-klein-groot-klein-klein-meetpakket, dan betekent dat *wel* dat de toxische druk die *berekend* wordt hoger-lager-lager-hoger-lager-lager zal zijn, maar dat betekent *niet* dat de toxische druk in het veld zo varieert. De toxische druk in het veld zal constanter zijn, als bijvoorbeeld het landgebruik in de monsterjaren eigenlijk constant is. Dat er in de jaren met een kleiner meetpakket dus een lagere toxische druk berekend wordt moet door een goede, doelgerichte data-analyse – en samenvatting afgehandeld worden. In het rapport van Postma et al. (2021) wordt hiervan een uitgebreid voorbeeld gegeven. Het is bij een groot-klein-klein-meetpakket logisch, om de lage waarden te zien als onderschatting van de werkelijke toxische druk, die gedurende alle zes jaren de hoge waarde zal hebben.

Bij de interpretatie van de resultaten voor een watersysteemverkenning is het dus belangrijk, dat de gebruiker de gegevens in Excel goed samenvat tot een ruimtelijk kaartbeeld van de mengsel toxische druk, door goed te kijken welke gegevens er beschikbaar zijn, hoe de stoffenpakketten wel of niet verschillen tussen plaatsen of momenten, en dan een doelgerichte analyse te maken om de gegevens goed samen te vatten.

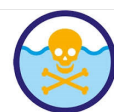
Als een kaartbeeld van de mengsel toxische druk wordt getoond, moet dat kaartbeeld naar beste kunnen een samenvatting geven van de ecotoxiciteit van het watersysteem. Dat is dus "meer" dan het berekenen van de toxische druk per regel in het invoerdatabestand: de gehele kaart, met kennis van de hydrologische verbanden en kennis van de economische activiteiten (bronnen van emissies) in relatie tot de toxische druk-variatie, is de basis voor interpretaties.

4.2 Verschillende doelen van de watersysteemanalyse

4.2.1 Vraagstellingen

De watersysteemanalyse moet voor chemische verontreinigingen behulpzaam zijn bij het snappen van het eventuele probleem met chemische verontreinigingen:

- De “waar-vragen”:
 - o Waar komt het voor?
 - o Waar komt het vandaan?

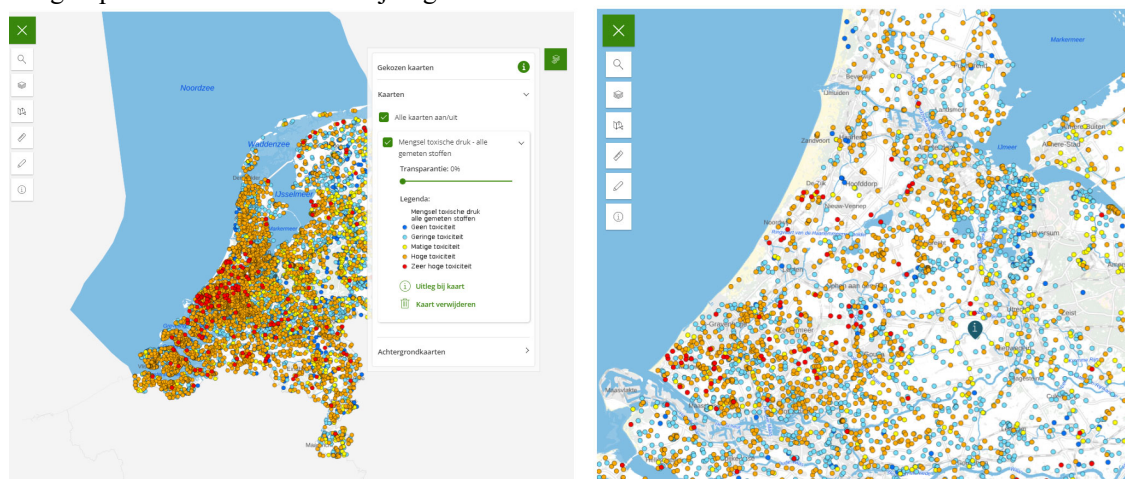


- Waar gaat het heen?
- De “wanneer-vragen”:
 - Zijn er trends in de tijd
 - Nemen ze toe?
 - Nemen ze af?
- De “wat te doen-vragen”:
 - Waar en wanneer zijn maatregelen nodig
 - Welke maatregelen zijn (kosten)effectief inzetbaar?
 - Tegen welke stofgroepen en/of stoffen?
 - Kunnen maatregelen ook op het niveau van landgebruik worden genomen, omdat stoffen vaak samen worden geëmitteerd?

Al deze mogelijke doelen zijn medebepalend voor de wijze waarop (eerst) de monitoring wordt opgezet, en (b) de ruwe uitvoerdata worden geanalyseerd.

4.2.2 Ruimtelijke variatie in toxische druk: kaartbeelden als eindresultaat

Als illustratie van de samenvatting van resultaten als kaartbeeld van een watersysteemanalyse wordt hieronder de recente kaart van de toxische druk van Nederland (data 2013-2018) getoond (Figuur 4). Een kaart beantwoordt vooral vragen over de plaatsen waar de toxische druk verhoogd is, en welke stofgroepen daaraan het sterkst bijdragen.

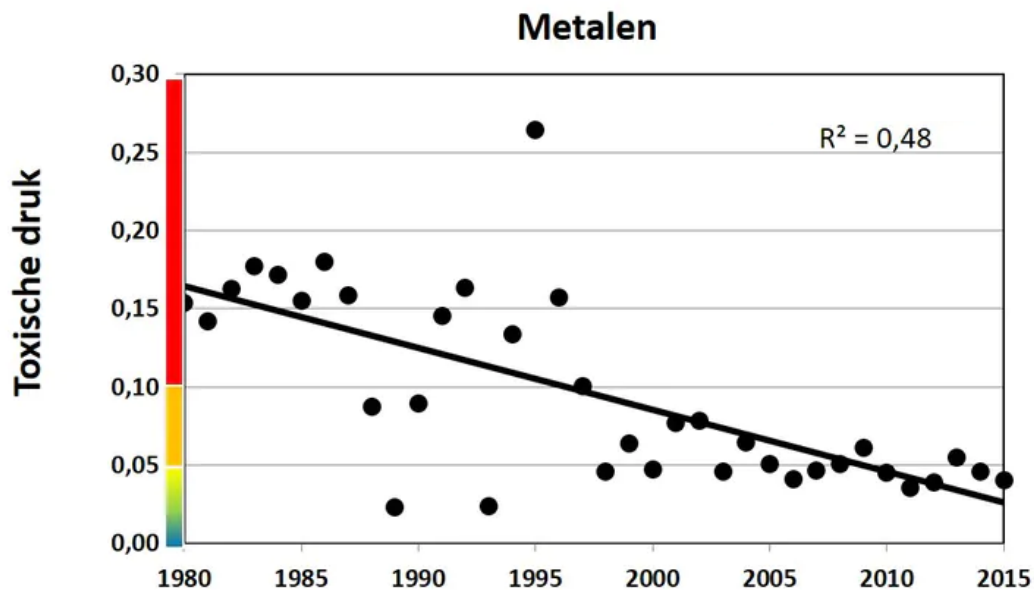


Figuur 4. Voorbeeld van de presentatie van de samengevatte resultaten van toxische druk berekeningen. Links: heel Nederland. Rechts: detaillering voor ‘laag Nederland’. Bron: Atlas Natuurlijk Kapitaal en website van SFT2. Deze atlaskaarten zijn ‘zoombaar’, en de gebruiker kan de aandacht richten op specifieke stofgroepen, of het totale mengsel van gemeten stoffen. Noot: de getoonde resultaten zijn altijd een onderschatting, als er meer stoffen aanwezig zijn dan dat er via de tool meegenomen worden in de bepaling van de toxische druk.

4.2.3 Trendanalyse als eindresultaat

Nieuwe economische activiteiten kunnen leiden tot achteruitgang van de waterkwaliteit, en maatregelen tot verbetering ervan. Het is dan ook wenselijk, dat de SFT2 inzichten kan geven in veranderingen in de tijd. **Figuur 5** toont een voorbeeld, waarbij de waterkwaliteit sinds 1980 verbeterde. De variatie rond de trendlijn wordt veroorzaakt door bijvoorbeeld het weer (natte en droge jaren, met meer- en minder uitspoeling van metalen uit de bodem en meer- en minder verdunning)





Figuur 5. Significante verbetering van de waterkwaliteit op een meetpunt in De Dommel, veroorzaakt door langdurige maatregelen tegen metaalverontreiniging. De Y-as geeft de berekende mengsel-toxische druk van de metalen als getalswaarden (meer-stoffen Potentieel Aangetaste Fractie, msPAF-EC50) en als SFT2-klassen (de kleuren). De onderverdeling voor de drie beste klassen (blauw, groen en geel) is gradueel weergegeven, omdat de berekeningen voor deze klassen nog niet tot op het niveau van de chronische toxische druk (msPAF-NOEC) zijn gespecificeerd.



Colofon

Deze notitie is geschreven in het kader van het project Toxiciteit van de Kennisimpuls Waterkwaliteit, en in 2024 geactualiseerd naar aanleiding van Helpdesk-vragen en gebruikerservaringen. In de Kennisimpuls werkten Rijk, provincies, waterschappen, drinkwaterbedrijven en kennisinstituten 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 brachten partijen bestaande en nieuwe kennis bijeen, en maakten ze deze kennis (beter) toepasbaar voor de praktijk. Hiermee verstevigden ze de basis onder het waterkwaliteitsbeleid. Het programma is gestart in 2018 en duurde vier jaar. Het werd gefinancierd door het ministerie van Infrastructuur en Waterstaat, STOWA, waterschappen, provincies en drinkwaterbedrijven.

Deze notitie is voor rekentool Versie 1.0 opgesteld in het kader van het Kennis Impuls Water Kwaliteit project “Toxiciteit”, en is aangevuld door een project dat door STOWA werd opgedragen aan het RIVM. De inhoud van Versie 1.0 is voorgelegd voor collegiale toetsing aan het kernteam van het project, en voor bruikbaarheid aan de gebruikersgroep van het project. Hun suggesties voor verbetering zijn in de eerste versie verwerkt. De inhoud van Versie 2.0 is door RIVM gecontroleerd, en wordt tevens onderworpen aan continue toetsing door eindgebruikers. Terugmeldingen van gebruikers kunnen leiden tot kleine versie-updates.

De in deze notitie gepresenteerde kennis is gebaseerd op de meest recente inzichten in het vakgebied. Desalniettemin moeten bij toepassing ervan de resultaten te allen tijde kritisch worden beschouwd. De auteur(s) en STOWA kunnen niet aansprakelijk worden gesteld voor eventuele schade die ontstaat door toepassing van het gedachtegoed uit deze publicatie.

Versiebeheer

Van dit document verschijnen zo nodig geactualiseerde versies. Dit gebeurt als kennis en inzichten toenemen, en de rekentool wordt aangepast, of als de gebruiksaanwijzing wordt aangescherpt (resp. versie 1.0, 2.0, 3.0 enz., en 1.1, 1.2, ...2.1, 2.2 enz.).

- Versie 2.0, 1 augustus 2024

Referenties

- Cade, B.S. and Noon, B.R. 2003. A gentle introduction to quantile regression for ecologists. *Frontiers in Ecology and the Environment* 1(8), 412-420.
- PBL 2020 Nationale Analyse Waterkwaliteit, Den Haag, the Netherlands.
- 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.

