

THE CIXOTI SE

stowa

ECOLOGISCHE SLEUTELFACTOR TOXICITEIT

➤ Deel 3

Technische handleiding en tips ESF-toxiciteit
Chemie tool



Rijksinstituut voor Volksgezondheid
en Milieu
Ministerie van Volksgezondheid,
Welzijn en Sport

stowa

Deltares
Enabling Delta Life



Ecofide
Natuurlijk vertrouwen



COLOFON

Amersfoort, september 2016

Uitgave Stichting toegepast Onderzoek Waterbeheer, Postbus 2180, 3800 CD Amersfoort

Auteurs Leo Posthuma (RIVM), Dick de Zwart (RIVM, DdZ Ecotox), Leonard Osté (Deltares), Jaap Postma (Ecofide).

Begeleidingsgroep Renée Talens (STOWA), Bas van der Wal (STOWA), Anke Durand-Huizing (Waterschap Vechtstromen), Roelof Veeningen (Wetterskip Fryslân), Miriam Colombon (Wetterskip Fryslân), Ronald Gylstra (Waterschap Rivierenland), Arjan de Bruine (Waterschap Rivierenland), Sanne Bink (Waterschap Rivierenland), Frans de Bles (Waterschap Vallei en Veluwe), Roel Knoben (Royal Haskoning DHV), Carti Aulich (Hoogheemraadschap van Delfland), Anja Derksen (ADECO advies), Laura Moria (Waternet), Jos Goossen (Waterschap Scheldestromen), Ernst Raaphorst (Hoogheemraadschap van Delfland).

Referaat De ecologische sleutelfactoren vormen een denkkader voor het uitvoeren van een ecologische watersysteemanalyse. Ze geven inzicht in het ecologisch functioneren van het watersysteem en in belangrijke stuurknoppen voor ecologisch herstel. Om inzicht te krijgen of toxiciteit een knelpunt voor het ecologisch functioneren van het watersysteem en in de effecten van stoffen op het waterleven is de sleutelfactor toxiciteit ontworpen en in een vijftal rapporten uitgewerkt. Voorliggend rapport is deel 3 en is een technische handleiding van de ontwikkelde rekentool waarbij op basis van gemeten stofconcentraties het te verwachten ecologische effect gemodelleerd wordt.

Trefwoorden Ecologische sleutelfactor, watersysteemanalyse, toxiciteit, ecologische effectbeoordelingen, technische handleiding, chemie tool.

Eindredactie Marloes van der Kamp (STOWA)

Vormgeving Shapeshifter, Utrecht

STOWA 2016-15 C

ISBN 978.90.5773.727.5

Copyright De informatie uit dit rapport mag worden overgenomen, mits met bronvermelding. De in het rapport ontwikkelde, dan wel verzamelde kennis is om niet verkrijgbaar. De eventuele kosten die STOWA voor publicaties in rekening brengt, zijn uitsluitend kosten voor het vormgeven, vermenigvuldigen en verzenden.

Disclaimer Dit rapport is gebaseerd op de meest recente inzichten in het vakgebied. Desalniettemin moeten bij toepassing ervan de resultaten te allen tijd kritisch worden beschouwd. De auteurs en STOWA kunnen niet aansprakelijk worden gesteld voor eventuele schade die ontstaat door toepassing van het gedachtegoed uit dit rapport.



INHOUDSOPGAVE

Colofon	3
Inhoudsopgave	4

1	INLEIDING	5
----------	------------------	----------

2	BESCHIKBAARHEID, OVERZICHT EN GEBRUIK VAN DE MS-ACCESS TOOL	6
2.1	MS-Access tool, of web-tool?	6
2.2	Installatie, inclusief koppeling met standaard-invoerbestand	6
2.3	Eventuele invoer fouten	6
2.4	Het uitvoeren van berekeningen	7
2.5	Uitvoer	7

3	SPECIFICATIE VAN DE BEREKENINGEN EN DE UITVOER VAN DE TOOL	8
3.1	Overzicht van het startscherm bij openen van de applicatie	8
3.2	Uitleg van de uitvoer	9
3.3	Details over het werken met invoergegevens	10
3.3.1	<i>Invoer – uitleg</i>	10
3.3.2	<i>Invoer – verplichte en overige gegevens</i>	11
3.3.3	<i>Harmoniseren van de monsteromschrijving</i>	12
3.3.4	<i>Verwijderen van alle waarden met het limietsymbool "<"</i>	12
3.3.5	<i>Ammoniak en ammonium</i>	12

4	AANDACHTSPUNTEN BIJ HET GEBRUIK VAN DE MS-ACCESS TOOL	14
4.1	Aanpak: beta-test van de Chemie-tool door waterschappen	14
4.2	Opmerkingen van gebruikers bij beta-test: uitleg en tips	14

LITERATUUR	20
-------------------	-----------

STOWA in het kort	21
-------------------	----



1 Inleiding

Het behouden en verkrijgen van schoon water is één van de taken waar waterbeheerders voor staan. Hiervoor stellen ze waterkwaliteitsdoelen op voor zowel de ecologie als de chemie. Voor het bereiken van deze doelen is het nodig maatregelen te nemen. Het is belangrijk dat de doelen die gekozen worden haalbaar zijn en dat de maatregelen goed gekozen worden, zodat ze effectief bijdragen aan het bereiken van de gekozen doelen. Hiervoor is een analyse nodig van het watersysteem.

STOWA heeft de methodiek van de ecologische sleutelfactoren (ESF'en) ontwikkeld voor zowel stilstaande als stromende wateren. De ecologische ESF'en bieden een kapstok voor het uitvoeren van watersysteemanalyses.

Voor stilstaande wateren zijn er negen sleutelfactoren ontwikkeld, waarbij:

- ESF 1 (productiviteit van het water), 2 (lichtklimaat) & 3 (productiviteit van de waterbodem) gaan over voorwaarden voor het voorkomen van ondergedoken waterplanten;
- ESF 4 (habitatgeschiktheid), 5 (verspreiding) & 6 (verwijdering) gaan over voorwaarden voor specifieke soortgroepen;
- ESF 7 (organische belasting) & 8 (toxiciteit) gaan over specifieke omstandigheden. Deze sleutelfactoren spelen alleen in specifieke situaties een rol;
- ESF 9 (context) gaat over de afweging tussen functies van watersystemen.

De sleutelfactor toxiciteit is toepasbaar voor zowel stilstaande, als stromende wateren.

In een serie van vijf rapporten is de sleutelfactor toxiciteit uitgewerkt. De serie bestaat uit een deel 1 hoofdrapport 'Ecologische sleutelfactor toxiciteit: methode voor het in beeld brengen van de effecten van giftige stoffen in het oppervlaktewater' en vier bijrapporten (deel 2,3,4 en 5).

Voorliggend rapport is rapport 3 en is een technische handleiding voor het toepassen van de ontwikkelde ESF-toxiciteit rekentool waarmee toxische druk kan worden afgeleid. De handleiding geeft aanwijzingen en tips voor het installeren en gebruiken van de ESF-toxiciteit Chemie rekentool.



2 Beschikbaarheid, overzicht en gebruik van de MS-Access tool

2.1 MS-ACCESS TOOL, OF WEB-TOOL?

Voor het ontwerp en de β -test van de ESF-toxiciteit Chemie rekentool is het ontwerpproces gebaseerd op programmeren en toepassen van de tool in de vorm van een MS-Access tool. Het MS-Access platform is geschikt voor berekeningen met grote invoer-data sets. Daarnaast biedt de tool een veelheid aan achterliggende berekeningen en detail informatie die nuttig kunnen zijn. Deze worden vanaf Hoofdstuk 2 uitgelegd. Dit hoofdstuk geeft de hoofdlijn van de stappen tussen invoer tot uitvoer.

In de toekomst kan blijken dat versie 1.0 door ervaringen bij de toepassing vereenvoudigd of aangepast moet worden. Voor de toekomst kan overwogen worden om een webapplicatie van de tool te maken en/of het beheer bijvoorbeeld onder te brengen bij het Informatiehuis Water.

2.2 INSTALLATIE, INCLUSIEF KOPPELING MET STANDAARD-INVOPERBESTAND

De MS-Access tool voor het berekenen van (mengsel-)toxische druk is vrij beschikbaar, en wordt verspreid als ZIP-bestand met een aantal andere bestanden.

Het ZIP-bestand wordt (tenzij de gebruiker iets anders kiest) ‘uitgepakt’ onder de root (C:\). In dat geval functioneert de Access-tool door het inlezen van het standaard-invoerbestand (“ConcentrationData.xlsx”), dat op de juiste locatie (ook onder de root C:\) geplaatst is en dus door de tool herkend wordt.

Gebruikers vullen de gegevens in, in het Excelbestand, onder behoud van de naam “ConcentrationData.xlsx” (vanwege de automatische koppeling met de MS-Access tool: de Access tool zoekt automatisch naar deze filenaam en leest die in). Uiteraard kan van iedere analyse eerst een Excel-invoerbestand met een eigen filenaam worden gemaakt en opgeslagen, maar de analyse van die data gaat via het tijdelijke Excel-bestand met de standaardnaam.

Indien de ZIP op een andere plaats wordt uitgepakt dient de gebruiker de locatie van de standaard-inleestabel “ConcentrationData.xlsx” handmatig te wijzigen volgens de voor MS-Access gebruikelijke stappen. Dit is niet moeilijk: open bestand msPAFcalculator.accdb, stop de macro, klik met de rechter muisknop op de tabel WaterConcentrationData en roep de Linked Table Manager aan, vink de vakjes voor de tabel WaterConcentrationData en de vraag naar een nieuwe locatie aan en selecteer vervolgens het bestand ConcentrationData.xlsx. Let op dat daarbij zo nodig aangeklikt wordt dat de eerste regel van de concentratie-data file aangeduid moet worden als regel met parametercodes (vinkje zetten). Bij goede afloop van dit geheel meldt MS-Access dat de tabel opnieuw is gelinkt. De goede invoer kan afgelezen worden door in de Access “WaterConcentrationData” aan te klikken, linksboven in het scherm. De excel (invoer) moet hetzelfde zijn als de Access-copie die nu op het scherm getoond wordt.

2.3 EVENTUELE INVOPER FOUTEN

Bij fouten in de invoer (opgeslagen invoer op een onjuiste locatie opgeslagen) of de invoergegevens (bijvoorbeeld onjuiste benamingen van kolommen) treedt een technische fout op in één van de laatste berekeningsstappen in de macro “Autoexec”. De invoergegevens worden daarom uitgelezen uit een gestandaardiseerd invoerformat in Excel; die file moet worden gekoppeld aan de rekentool.

Noot: De Query “P99MakePrimaireIndexFinalmsPAF Results” voor het toekennen van een sorteerindex aan de uitvoer kan worden gehinderd door verschillen in de gedetailleerde monsteromschrijvingen die zijn toegekend aan de invoer regels met een gelijke SampleID. Oplossing voor dit probleem is het harmoniseren van de gedetailleerde monsteromschrijvingen die bij elkaar horen. Gebleken is dat dit veelal is toe te schrijven aan een verschil in tijdcode van monsters van eenzelfde locatie.



2.4 HET UITVOEREN VAN BEREKENINGEN

Het berekenen van alle uitvoergegevens komt tot stand door het openen van de MS-Access tool, waarna de berekeningen automatisch uitgevoerd worden. De rekentool werkt altijd op basis van correctie van biobeschikbaarheid. Indien daartoe de invoerparameters (zoals pH, DOC) missen, worden er default-waarden voor die parameters gebruikt (zie voor uitleg van de default-waarden Deel 1 van deze serie rapporten over de ESF-toxiciteit).

2.5 UITVOER

De tool levert als uitvoer een MS-Excel bestand, met als bestandsnaam de volgende opbouw: “20150813085047-msPAFR-results.xlsx”, waarbij in deze filenaam een *jaar / maand / dag / uur / minuut / seconde als datum/tijd-stempel* van de berekening herkenbaar is.

Na de automatisch verlopende berekeningen is het mogelijk om een studie te maken van alle tussenresultaten door simpelweg te dubbelklikken op de namen van de afzonderlijke “select queries” (links in het Access-scherf).

De procesomschrijving van alle berekeningen is gegeven in de tabel “ExplanationSequentialQueries&Processes”. Uit die tabel kan afgeleid worden wat exact wordt berekend, en hoe dat stapsgewijs wordt gedaan.

3 Specificatie van de berekeningen en de uitvoer van de tool

3.1 OVERZICHT VAN HET STARTSCHERM BIJ OPENEN VAN DE APPLICATIE

Het startscherm van de Access-applicatie is als volgt ingedeeld:

- Linksboven staan onder “All Access Objects” een aantal keuze-knoppen;
- Linksonder staan onder “Queries” de opdrachten die gegeven kunnen worden;
- Rechts worden (na dubbelklik op een Object of een Query) de resultaten getoond.

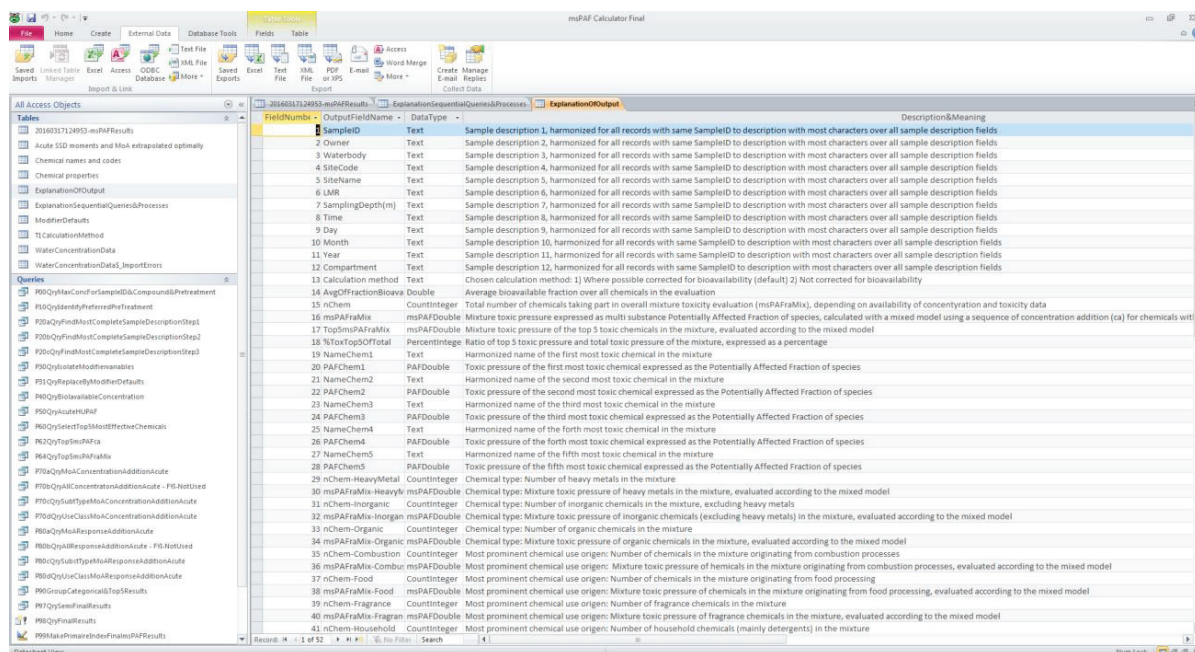
De rekentool bevat (achter al de getoonde knoppen aan de linkerzijde) een grote hoeveelheid gegevens over de ecotoxiciteit van stoffen en andere noodzakelijke gegevens. Zie als voorbeeld de uitslag van de knop ‘Tables’ in Figuur 1.

Deze gegevens worden in MS-Access via de invoer van concentratie-gegevens uit een watersysteemanalyse bewerkt tot de uitvoer: de diverse vormen van toxische druk (1) van het totale mengsel, (2) van stofgroepen of (3) van stoffen. Die resultaten kunnen geëxporteerd worden naar MS-Excel voor verdere interpretatie. De ESF-toxiciteit Chemietool levert alleen de gevraagde uitkomsten, en de interpretatie-stap is daarna een cruciale stap.

De door de Chemietool uitgevoerde bewerkingen zijn vastgelegd in zogenoemde Queries (bewerkingsstappen, linksonder in Figuur 1). De Queries die de tool uitvoert om van concentratie-gegevens te komen tot toxische-druk resultaten zijn in de tool beschreven. Figuur 1 toont (a) de typerende indeling van het MS-Access scherm bij openen van de tool, bij (b) het indrukken van de knop “Explanation of Output” (links, onder de groep “All Access Objects”). Door deze knop aan te klikken wordt (rechts) de technische uitleg van de diverse rekenstappen in tabelvorm getoond.

FIGUUR 1

Figuur met een MS-Access schermoverzicht van de ESF-toxiciteit Chemie-tool. Links worden de Access Tabellen (boven) en Queries (onder) en de Macro's (buiten dit schermoverzicht) van de rekentool getoond. Rechts wordt een uitvoer getoond, in dit geval van de linksboven aangeklikte Tabel (grijze balk) “ExplanationOfOutput”. Deze tabel bevat 52 regels, waarvan er 41 getoond kunnen worden in de figuur. Dergelijke uitvoer wordt in het grote veld getoond door links (All Access Objects) een regel aan te klikken. De resultaten van het gewenste uitvoerscherm (rechts) kunnen op de gebruikelijke wijze (selecteren, kopiëren) geëxporteerd worden voor verdere analyse van de (tussen) resultaten van verschillende rekenstappen, via Excel.



FieldNumber	OutputFieldName	Data Type	Description&Meaning
1	SampleID	Text	Sample description 1, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters over all sample description fields
2	Owner	Text	Sample description 2, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters over all sample description fields
3	Waterbody	Text	Sample description 3, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters over all sample description fields
4	SiteCode	Text	Sample description 4, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters over all sample description fields
5	SiteName	Text	Sample description 5, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters over all sample description fields
6	LMR	Text	Sample description 6, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters over all sample description fields
7	SamplingDepth(m)	Text	Sample description 7, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters over all sample description fields
8	Time	Text	Sample description 8, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters over all sample description fields
9	Day	Text	Sample description 9, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters over all sample description fields
10	Month	Text	Sample description 10, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters over all sample description fields
11	Year	Text	Sample description 11, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters over all sample description fields
12	Compartment	Text	Sample description 12, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters over all sample description fields
13	Calculation method	Text	Chosen calculation method: 1) Where possible corrected for bioavailability (default) 2) Not corrected for bioavailability
14	AvgOffFractionBioava	Double	Average bioavailable fraction over all chemicals in the evaluation
15	nChem	CountInteger	Total number of chemicals taking part in overall mixture toxicity evaluation (msPAFRmix), depending on availability of concentration and toxicity data
16	msPAFRmix	msPAFDouble	Mixture toxic pressure expressed as multi substance Potentially Affected Fraction of species, calculated with a mixed model using a sequence of concentration addition (ca) for chemicals with
17	Top5msPAFRmix	msPAFDouble	Mixture toxic pressure of the top 5 toxic chemicals in the mixture, evaluated according to the mixed model
18	%ToxTop5OfTotal	PercentInteger	Ratio of top 5 toxic pressure and total toxic pressure of the mixture, expressed as a percentage
19	NameChem1	Text	Harmonized name of the first most toxic chemical in the mixture
20	PAFChem1	PAFDouble	Toxic pressure of the first most toxic chemical expressed as the Potentially Affected Fraction of species
21	NameChem2	Text	Harmonized name of the second most toxic chemical in the mixture
22	PAFChem2	PAFDouble	Toxic pressure of the second most toxic chemical expressed as the Potentially Affected Fraction of species
23	NameChem3	Text	Harmonized name of the third most toxic chemical in the mixture
24	PAFChem3	PAFDouble	Toxic pressure of the third most toxic chemical expressed as the Potentially Affected Fraction of species
25	NameChem4	Text	Harmonized name of the fourth most toxic chemical in the mixture
26	PAFChem4	PAFDouble	Toxic pressure of the fourth most toxic chemical expressed as the Potentially Affected Fraction of species
27	NameChem5	Text	Harmonized name of the fifth most toxic chemical in the mixture
28	PAFChem5	PAFDouble	Toxic pressure of the fifth most toxic chemical expressed as the Potentially Affected Fraction of species
29	nChem-HeavyMetal	CountInteger	Chemical type: Number of heavy metals in the mixture
30	msPAFRmix-Heavy	msPAFDouble	Chemical type: Mixture toxic pressure of heavy metals in the mixture, evaluated according to the mixed model
31	nChem-Inorganic	CountInteger	Chemical type: Number of inorganic chemicals in the mixture, excluding heavy metals
32	msPAFRmix-Inorganic	msPAFDouble	Chemical type: Mixture toxic pressure of inorganic chemicals (excluding heavy metals) in the mixture, evaluated according to the mixed model
33	nChem-Organic	CountInteger	Chemical type: Number of organic chemicals in the mixture
34	msPAFRmix-Organic	msPAFDouble	Chemical type: Mixture toxic pressure of organic chemicals in the mixture, evaluated according to the mixed model
35	nChem-Combustion	CountInteger	Most prominent chemical use origin: Number of chemicals in the mixture originating from combustion processes
36	msPAFRmix-Combustion	msPAFDouble	Most prominent chemical use origin: Mixture toxic pressure of chemicals in the mixture originating from combustion processes, evaluated according to the mixed model
37	nChem-Food	CountInteger	Most prominent chemical use origin: Number of chemicals in the mixture originating from food processing
38	msPAFRmix-Food	msPAFDouble	Most prominent chemical use origin: Mixture toxic pressure of chemicals in the mixture originating from food processing, evaluated according to the mixed model
39	nChem-Fragrance	CountInteger	Most prominent chemical use origin: Number of fragrance chemicals in the mixture
40	msPAFRmix-Fragrance	msPAFDouble	Most prominent chemical use origin: Mixture toxic pressure of fragrance chemicals in the mixture, evaluated according to the mixed model
41	nChem-Household	CountInteger	Most prominent chemical use origin: Number of household chemicals (mainly detergents) in the mixture



3.2 UITLEG VAN DE UITVOER

De belangrijkste reden voor het gebruik van de Chemietool is het verkrijgen van eindresultaten. Die worden kwantitatief op het uitvoerblad getoond (knop “201604050104009-msPAFresults” linksboven), met de uitleg van de 52 resultaten zoals samengevat in Tabel 1. Alle aspecten van deze resultaten (waarom ze afgeleid worden, hoe ze afgeleid worden, en wat ze betekenen) worden toegelicht in rapport Deel 1 van de serie ESF-toxiciteit rapporten.

Voor de veldnummers in de rekentool geldt de volgende uitleg op hoofdlijnen, met de precieze (Engelse) uitleg in de Tabel:

- 1 tot en met 12: monstercoderings-gegevens;
- 13 en 14: omgaan met biobeschikbaarheidscorrectie: default: ja, correctie uitvoeren;
- 15 en 16: aantal stoffen dat bijdraagt aan de mengsel-toxische druk, en de mengsel toxische druk van het monster (alle gemeten stoffen);
- 17 tot en met 28: prioritering van de top-5 van stoffen die het sterkst bijdragen aan de in kolom 16 getoonde mengsel-toxische druk, steeds als naam van de stof, en de toxische druk van de stof die als 1^e, 2^e, 3^e, 4^e of 5^e bijdraagt aan de mengsel-toxische druk;
- 29 en 30: toxische-druk resultaten voor de specifieke stofgroep metalen;
- 31 en 32: toxische-druk resultaten voor de specifieke stofgroep anorganische verbindingen;
- 33 en 34: toxische-druk resultaten voor de specifieke stofgroep organische verbindingen;
- vanaf 35 (tot 52): toxische-druk resultaten voor specifieke vormen van het gebruik van stoffen, achtereenvolgens: verbranding (combustion), voedselproductie (food), geurstoffen (fragrance), huishoudchemicaliën (household chemicals), chemicaliën geëmitteerd door industriële processen, natuurlijke stoffen (natural), hygiëne producten (personal care products), pesticiden (pesticides) en geneesmiddelen (pharmaceuticals).

Door de (gewenste tussen)resultaten aan te klikken en te exporteren (na keuze van de knop “201604050104009-msPAF-results” linksboven, gevolgd door kopiëren en plakken in Excel) kan de gebruiker de gewenste watersysteemanalyse uitvoeren. In Excel kunnen bijvoorbeeld gemiddelde waarden van de toxische druk berekend worden voor een subserie van monsters, of een tijds-trend, enzovoorts.

TABEL 1

Overzicht van de uitvoer van de Chemietool. Voor een monster worden 52 resultaten berekend of samengevat.

FieldNumber	OutputFieldName	DataType	Description&Meaning
1	SampleID	Text	Sample description 1, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters
2	Owner	Text	Sample description 2, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters
3	Waterbody	Text	Sample description 3, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters
4	SiteCode	Text	Sample description 4, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters
5	SiteName	Text	Sample description 5, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters
6	LMR	Text	Sample description 6, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters
7	SamplingDepth(m)	Text	Sample description 7, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters
8	Time	Text	Sample description 8, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters
9	Day	Text	Sample description 9, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters
10	Month	Text	Sample description 10, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters
11	Year	Text	Sample description 11, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters
12	Compartment	Text	Sample description 12, harmonized for all records with same SampleID to description with most characters
13	Calculation method	Text	Chosen calculation method: 1) Where possible corrected for bioavailability (default) 2) Not corrected for
14	AvgOfFractionBioavailable	Double	Average bioavailable fraction over all chemicals in the evaluation
15	nChem	CountInteger	Total number of chemicals taking part in overall mixture toxicity evaluation (msPAFraMix), depending on availability of concentration and toxicity data
16	msPAFraMix	msPAFDouble	Mixture toxic pressure expressed as multi substance Potentially Affected Fraction of species, calculated with a mixed model using a sequence of concentration addition (ca) for chemicals with same Toxic Mode
17	Top5msPAFraMix	msPAFDouble	Mixture toxic pressure of the top 5 toxic chemicals in the mixture, evaluated according to the mixed
18	%ToxTop5OfTotal	PercentInteger	Ratio of top 5 toxic pressure and total toxic pressure of the mixture, expressed as a percentage
19	NameChem1	Text	Harmonized name of the first most toxic chemical in the mixture
20	PAFChem1	PAFDouble	Toxic pressure of the first most toxic chemical expressed as the Potentially Affected Fraction of species
21	NameChem2	Text	Harmonized name of the second most toxic chemical in the mixture
22	PAFChem2	PAFDouble	Toxic pressure of the second most toxic chemical expressed as the Potentially Affected Fraction of species
23	NameChem3	Text	Harmonized name of the third most toxic chemical in the mixture
24	PAFChem3	PAFDouble	Toxic pressure of the third most toxic chemical expressed as the Potentially Affected Fraction of species
25	NameChem4	Text	Harmonized name of the fourth most toxic chemical in the mixture
26	PAFChem4	PAFDouble	Toxic pressure of the fourth most toxic chemical expressed as the Potentially Affected Fraction of species
27	NameChem5	Text	Harmonized name of the fifth most toxic chemical in the mixture
28	PAFChem5	PAFDouble	Toxic pressure of the fifth most toxic chemical expressed as the Potentially Affected Fraction of species
29	nChem-HeavyMetal	CountInteger	Chemical type: Number of heavy metals in the mixture
30	msPAFraMix-HeavyMetal	msPAFDouble	Chemical type: Mixture toxic pressure of heavy metals in the mixture, evaluated according to the mixed
31	nChem-Inorganic	CountInteger	Chemical type: Number of inorganic chemicals in the mixture, excluding heavy metals
32	msPAFraMix-Inorganic	msPAFDouble	Chemical type: Mixture toxic pressure of inorganic chemicals (excluding heavy metals) in the mixture, evaluated according to the mixed model
33	nChem-Organic	CountInteger	Chemical type: Number of organic chemicals in the mixture
34	msPAFraMix-Organic	msPAFDouble	Chemical type: Mixture toxic pressure of organic chemicals in the mixture, evaluated according to the
35	nChem-Combustion	CountInteger	Most prominent chemical use origin: Number of chemicals in the mixture originating from combustion
36	msPAFraMix-Combustion	msPAFDouble	Most prominent chemical use origin: Mixture toxic pressure of chemicals in the mixture originating from combustion processes, evaluated according to the mixed model
37	nChem-Food	CountInteger	Most prominent chemical use origin: Number of chemicals in the mixture originating from food
38	msPAFraMix-Food	msPAFDouble	Most prominent chemical use origin: Mixture toxic pressure of chemicals in the mixture originating from food processing, evaluated according to the mixed model
39	nChem-Fragrance	CountInteger	Most prominent chemical use origin: Number of fragrance chemicals in the mixture
40	msPAFraMix-Fragrance	msPAFDouble	Most prominent chemical use origin: Mixture toxic pressure of fragrance chemicals in the mixture,
41	nChem-Household	CountInteger	Most prominent chemical use origin: Number of household chemicals (mainly detergents) in the mixture
42	msPAFraMix-Household	msPAFDouble	Most prominent chemical use origin: Mixture toxic pressure of household chemicals (mainly detergents) in the mixture, evaluated according to the mixed model
43	nChem-Industrial	CountInteger	Most prominent chemical use origin: Number of industrial chemicals in the mixture
44	msPAFraMix-Industrial	msPAFDouble	Most prominent chemical use origin: Mixture toxic pressure of industrial chemicals in the mixture,
45	nChem-Natural	CountInteger	Most prominent chemical use origin: Number of chemicals in the mixture mainly originating from natural
46	msPAFraMix-Natural	msPAFDouble	Most prominent chemical use origin: Mixture toxic pressure of chemicals in the mixture mainly originating from natural processes (material cycling), evaluated according to the mixed model
47	nChem-PersonalCareProd	CountInteger	Most prominent chemical use origin: Number of chemicals related to personal care products in the
48	msPAFraMix-PersonalCareProd	msPAFDouble	Most prominent chemical use origin: Mixture toxic pressure of chemicals related to personal care products in the mixture, evaluated according to the mixed model
49	nChem-Pesticide	CountInteger	Most prominent chemical use origin: Number of chemicals classified as pesticides in the mixture
50	msPAFraMix-Pesticide	msPAFDouble	Most prominent chemical use origin: Mixture toxic pressure of chemicals classified as pesticides in the mixture, evaluated according to the mixed model
51	nChem-Pharmaceutical	CountInteger	Most prominent chemical use origin: Number of chemicals classified as pharmaceuticals in the mixture
52	msPAFraMix-Pharmaceutical	msPAFDouble	Most prominent chemical use origin: Mixture toxic pressure of chemicals classified as pharmaceuticals in the mixture, evaluated according to the mixed model

3.3 DETAILS OVER HET WERKEN MET INVOERGEGEVENS

3.3.1 Invoer – uitleg

De invoer van de Chemietool is cruciaal. De invoer loopt via een zogenaamde *list-format*, met een aantal monstergegevens. Tabel 2 geeft de kolommen waarvoor invoergegevens verplicht zijn (in groen) en een aantal andere gegevens (facultatief), met hun uitleg. Alle data voor één monster (locatie, tijd) moeten op één regel worden ingevoerd, en de SampleID van één monster moet – ook als de gegevens over dit monster over meerdere regels van de Excel invoer verdeeld zijn (meerdere stoffen in één monster) *echt identiek zijn*. Anders herkent Access de gegevens van meerdere stoffen van één monster niet als behorend bij dat ene monster!

De uitleg van de invoergegevens volgens het toelichtende tabblad in het Excel-invoerbestand.

Column/Heading	Description	Max # Characters	Choices	Obligatory	Example	Remarks
ID	Incremental ID number (unique)	Integer		Yes	35306	
SampleID	Sample code	text 255		Yes	e33_2006_8	
Owner	Origin of the data	text 255		No	Stichtse Rijnlanden	
Waterbody	Name waterbody	text 255		No	Kromme Rijn	
SiteCode	Site code			Yes	e33	
SiteName	Site na,e	text 255		No	Odijk 1	
LMR	Left/Middle/Right in streambed	text 255	L or M or R	No	L	
Samplingdepth(m)	Sampling depth in meter	text 255		No	2	
Time	Sampling time as text	text 255		No	12:15	
Day	Sampling day of the month	text 255		No	23	
Month	Sampling month of the year	text 255		No	8	
Year	Sampling year	text 255		No	2005	
Compartment	Sampled environmental compartment	text 255	This version only SW for surface water	Yes	W	
Pretreatment	Sample pretreatment	text 255	F = filtered, T = totaal	Yes	T	
Aquocode	Aquo code	text 255		Yes	112274ClC2a	
CAS	CAS number with dashes	text 255		No	79-34-5	
CAS#	CAS number without dashes	text 255		No	79345	
ChemName	Subtrance name	text 255		No	1,1,2,2-tetrachloroethane	
MeasuredValue	Measured value	Double precision number		Yes	0.1	All toxicants should be reported in ug/L!!!
Unit	Unit of measured value	text 255		Yes	ug/L	All toxicants should be reported in ug/L!!!
Remarks	Bm,rks if any	text 255		No	Blp bla	

[illegible]



3.3.3 Harmoniseren van de monsteromschrijving

Voor de berekeningen is het essentieel dat de gedetailleerde monsteromschrijving gelijk wordt gemaakt voor alle analyses met dezelfde monsteridentificatie (SampleID). De gedetailleerde monsteromschrijving bestaat uit de tekstuele informatie die overigens niet verplicht hoeft te worden ingevuld zoals getoond in Tabel 4.

TABEL 4

Excel kolommen met gedetailleerde monsteromschrijving.

Kolom titel	Omschrijving
Owner	Eigenaar van de gegevens
Waterbody	Waterlichaam
SiteCode	Locatiecode
SiteName	Locatienaam
LMR	Monsterplek Links/Midden/Rechts
SamplingDepth(m)	Monsterdiepte in meter
Time	tijd
Day	Dag van de maand
Month	Maand
Year	Jaar

3.3.4 Verwijderen van alle waarden met het limietsymbool "<"

Voor meerdere stoffen ligt de standaard gehanteerde rapportagegrens op een niveau waarop de tool een effect (verhoogde PAF en dus ook een bijdrage aan de msPAF) oplevert. Ook de vaak gehanteerde regel om dan de helft van de rapportagegrens te hanteren kan een betekenisloos resultaat opleveren. Als namelijk een breed pakket stoffen is geanalyseerd, waarbij er meerdere stoffen onder de rapportagegrens liggen, kan iedere individuele rapportagegrens (zelfs na eventuele halvering) enkele procenten toxische druk opleveren *zonder dat er een stof gemeten is*. Opgeteld over alle stoffen onder de rapportagegrens kan dit ongemerkt tot een significante (*maar betekenisloze*) bijdrage aan de mengsel-toxische druk leiden. Daarom worden bij het analyseren van de toxische druk alle analyses onder de detectiegrens uit de dataset verwijderd. De resulterende (mengsel-) toxische druk waarden zijn vervolgens betekenisvol, omdat ze allen zijn gebaseerd op meetbare concentraties.

Noot: verschillende laboratoria en meetmethoden kunnen voor één stof verschillende rapportagegrenzen hebben. De essentie van dit stukje is, dat de Chemietool rekent met de waarden die ingevoerd worden, en dit stukje betekent: alleen betekenisvolle concentraties (concentraties die gemeten zijn, waarvan dus vastgesteld is dat de stof bewezen op een zekere concentratie aanwezig is) invoeren. Anders wordt de uitvoer betekenisloos.

3.3.5 Ammoniak en ammonium

Het ammoniak/ammonium gehalte wordt veelal gemeten als totaal ammonium ($\text{NH}_3 + \text{NH}_4^+$). Van deze twee vormen is ammoniak veruit het meest giftig voor waterorganismen. De toxiciteit (mediane EC50-waarden) voor NH_3 , NH_4OH en NH_4^+ voor waterorganismen hebben respectievelijk de volgende waarden: 8.613, resp. 54.075 en 27.810 mg/L. De reken-tool bepaalt op basis van pH en watertemperatuur de verhouding tussen $\text{NH}_3 + \text{NH}_4^+$, zodat de toxiciteit van ammoniak/ammonium wordt berekend bij de door de gebruiker ingevoerde gegevens. De rekentool bewerkt deze gegevens als volgt:

De concentraties NH_3 en NH_4^+ zijn bij beschikbaarheid van informatie over pH en temperatuur eenvoudig om te rekenen uit de resultaten van de gangbare meting waarin het totaal ammoniumgehalte is gekwantificeerd. De hierbij te gebruiken formules luiden (EPA 2013):



- $pK_a \text{ (bij temperatuur } T \text{ in } ^\circ\text{C)} = 0.09018 + (2729.92 / (273.2 + T))$
- $\text{Fractie NH}_3 = 1 / (1 + 10^{(pK_a - pH)})$
- $\text{Fractie NH}_4^+ = 1 - \text{Fractie NH}_3$
- De mediaan EC50 van het lokale mengsel van NH_3 en NH_4^+ = $\text{Fractie NH}_3 * 8613 + \text{Fractie NH}_4^+ * 231429 \text{ mg/L}$

Noot: Het is voor het toepassen van deze berekening essentieel dat het totaal ammonium gehalte is ingevoerd met als stofcodering sN-H3NH4 (AquoCode).



4 Aandachtspunten bij het gebruik van de MS-Access tool

4.1 AANPAK: BETA-TEST VAN DE CHEMIE-TOOL DOOR WATERSCHAPPEN

Bij een β -test, die uitgevoerd werd door toepassing van de ESF-toxiciteit Chemie rekentool door een aantal waterschappen, bleken er specifieke aandachtspunten genoemd te worden die voor alle gebruikers als 'tip' handig zijn om te weten. Door dergelijke gebruikers-ervaringen te aggregeren (hieronder, en/of via een verdere verzameling van tips en gebruikerservaringen) wordt het gebruik van de Chemie-tool beter. De tot heden specifiek genoemde opmerkingen zijn hieronder samengevat, en van toelichting voorzien. De opmerkingen zijn alfabetisch gesorteerd.

4.2 OPMERKINGEN VAN GEBRUIKERS BIJ BETA-TEST: UITLEG EN TIPS

Hieronder staan, alfabetisch gesorteerd, de terugmeldingen uit de β -test, die uitgevoerd werd in november 2015 tot en met februari 2016.

Aquo-standaard

Opmerking: De invoer-worksheet (Excel) zou aan moeten sluiten op de Aquo-standaard (zie <http://www.aquo.nl>). Deze standaard is de uniforme taal voor de uitwisseling van gegevens binnen de watersector. Het gaat bijvoorbeeld om Engelse termen, eenheden, codes, het gebruik van het woord grootheid of parameter, enzovoorts.

Uitleg: De invoer-sheet in Excel is zodanig gemaakt, dat deze geschikt is voor de ESF-toxiciteit beoordelingen in het Chemie-spoor. De invoer bestaat uit concentraties (stoffen) en een aantal overige gegevens (monster-codering, waterkwaliteits-parameters, enz.). Voorzien is dat de tool onder de Kaderrichtlijn Water ook internationaal zal worden toegepast. Dat leidde tot de beslissing om de tool in het Engels te programmeren, en tot een aantal andere feitelijkheden, zoals rond CAS-nummers, stofnamen, enzovoorts. Zowel bij het ontwerp en bouw als bij de huidige toepassing werkt de tool naar behoren. Op basis van (nog te verzamelen) praktijkervaring met deze versie van de tool kan een via het web beheerde tool worden gemaakt. De grootste ontwerp-stap voor een web beheerde tool is al via de huidige tool gemaakt. Bij een via het web beheerde tool kan eenvoudig een Nederlandse versie met Aquo-standaarden worden gemaakt, naast een identieke (aanklikbare) Engelse of Duitse versie. Voor de huidige tool betekent dit, dat de gebruiker enkele conversie-stappen zal moeten doen, als dat nodig is. Let daarbij op onder meer op "eenheden" (zoals $\mu\text{g/L}$ of mg/L), de mogelijkheid dat stofnamen internationaal op meerdere manieren gespeld worden, enzovoorts.

Foutmeldingen

Opmerking: Een complete lijst met foutmeldingen en oplossingen is wenselijk.

Uitleg: Foutmeldingen kunnen gaan over fouten in de invoerdata, de tool, en de uitvoerdata, en kunnen inhoudelijk of technisch van aard zijn. Een inhoudelijk fout is bijvoorbeeld een fout-gespelde stofnaam. Een technische fout is bijvoorbeeld het niet goed koppelen van de invoer-worksheet aan de MS-Access tool. Door het grote aantal potentiële problemen wordt vooralsnog uitgegaan van 'handigheid en oplossingen' door toepassing en een zekere mate van expertise op het vakgebied van de beoordeling van stoffen. Zoals in Hoofdstuk 1 van het ESF-toxiciteit rapport Deel 1 wordt vermeld, is de ESF-tool voor Toxiciteit een bijzondere tool, omdat er in principe meer dan 100.000 stoffen aan de tool zouden moeten kunnen worden toegevoegd en beoordeeld. Het *onderwerp van de ESF-toxiciteit tool is dus complex*, en daardoor moeten we uitgaan van gebruikers met verstand van zaken, die bovendien (met deze tool) ervaring op kunnen doen, en daardoor de meeste problemen die ze tegenkomen zelf kunnen oplossen, bv. met deze handleiding. De handleiding is zo opgesteld, dat de belangrijkste problemen en oplossingen van technische aard beschreven zijn; de gebruikers kunnen inhoudelijke problemen vaak door hun expertise oplossen (bv. omgaan met de metingen van ammonium/ammonia).



Interpretatie – eindresultaten: defaults en aannames

- Opmerking:** De ESF-toxiciteit Chemie tool berekent toxische druk-resultaten aan de hand van monstergegevens, die zowel concentraties van toxische stoffen omvatten als ook de waarden voor parameters die de biobeschikbaarheid – en vervolgens de toxische druk – mede bepalen. Daarbij worden soms aannames en *default*-waarden gebruikt. Kan dat gerapporteerd worden?
- Uitleg:** De gebruiker kan de belangrijkste aannames die gedaan worden direct zelf bepalen door naar de invoergegevens te kijken:
- Stoffen waarvoor geen concentraties worden ingevoerd leiden niet tot een uitslag. De toxische druk van dergelijke stoffen is niet bekend.
 - Parameters die de biobeschikbaarheid van stoffen kunnen beïnvloeden maar niet worden ingevoerd leiden tot een inschatting van de biobeschikbaarheid met behulp van de voor Nederland typerende *default*-waarden. De aanpak is beschreven in Deel 1 van de ESF-toxiciteit rapportenserie.

Interpretatie – eindresultaten: aantal stoffen per monster

- Opmerking:** Het aantal per monster gemeten stoffen kan sterk verschillen. Daardoor kan de berekende toxische druk van een serie monsters systematisch hoger worden als er steeds meer stoffen worden gemeten. Hoe moet dit effect gehanteerd worden?
- Uitleg:** Deze praktijkvraag werd gesteld, omdat oude monstergegevens/series, of series van verschillende waterbeheerders, sterk verschillende aantallen en typen stoffen bevatten. De vuistregel bij het rangordenen van watermonsters qua toxiciteit is uiteraard, dat de rangorde (hier: van voorspelde ecologische effecten) het meest zinnig is, als de serie monsters homogeen van aard is (zelfde set stoffen). Het is logisch dat er een systematisch effect te verwachten zal zijn van het meenemen van steeds meer stoffen, namelijk: toevoegen van stoffen met gemeten concentraties kan (alleen) leiden tot hogere toxische druk. Dit is een belangrijke constatering, waarop men alert moet zijn bij het (a) stellen van de beleids- of beheersvraag voor een watersysteem, (b) het samenstellen van het datapakket (liefst alle monsters dezelfde metingen, dan klopt de rangorde), (c) het interpreteren van de resultaten. Deze problematiek kan voorkómen worden door het opzetten van een systematisch meetprogramma (met voor elk monster dezelfde stoffencombinatie). In de rapporten 1 en 2 van de ESF- toxiciteit rapportenserie staan enkele uitgewerkte voorbeelden. De watersysteem-analist dient bij de interpretatie waakzaam te zijn op mogelijke effecten van dit verschijnsel op de interpretatie van de ESF-toxiciteit, onder meer door een check op het aantal ingevoerde stoffen per monster. Ervaring leert echter, dat het effect kwantitatief klein kan zijn, doordat in de bekende ESF-toxiciteit resultaten er heel vaak sprake is van slechts een kleine fractie stoffen die een groot deel van de mengsel-toxische druk bepaalt. Anders gezegd: heel veel stoffen ‘doen er kwantitatief niet zo veel toe voor de effecten op de ecologie’. Het effect moet dus gecontroleerd worden bij de interpretatie, maar het effect kan in veel gevallen heel klein zijn.

Interpretatie – eindresultaten: vereenvoudiging

- Opmerking:** De ESF-toxiciteit Chemie tool levert een enorm aantal mogelijkheden om resultaten en tussen-resultaten in te zien, te controleren en te analyseren, bv. in Excel. De overdaad kan beleefd worden als belemmerend, en de vraag is of er minder uitvoer gegenereerd kan worden.
- Uitleg:** Er is gekozen voor transparante opbouw van de uitvoer. Dat is inhoudelijk cruciaal. Zoals in Hoofdstuk 2 van Deel 1 van deze rapportenserie is omschreven, is de beoordeling van toxiciteit in watersystemen een onderwerp dat van nature complex is (met potentieel meer dan 100.000 stoffen die beoordeeld zouden moeten kunnen worden). De uitvoer-sheet in Excel omvat de samenvattende uitvoergegevens die bij de meest voorkomende vraagstellingen nodig zijn. Met die automatisch gegenereerde uitvoer kunnen de gebruikers zelf door bewerkingen tot nuttige samenvattende interpretaties komen. Bijvoorbeeld: een trend in de tijd vaststellen, door de jaargemiddelden van series monsters te berekenen. De ervaring leert, dat



die einduitslag de gezochte eenvoud biedt. Het maken van de samenvatting is echter afhankelijk van de vraagstelling. Door de diversiteit aan vraagstellingen levert de tool dus de gekozen (complete) uitvoer. De tussenstappen van berekeningen kunnen in de MS-Access tool worden opgezocht indien gewenst.

Invoergegevens – aard en aantal

- Opmerking:** De ESF-toxiciteit tool kan bruikbaar worden als alleen de verplichte kolommen, waarin de parameters staan die in berekeningen gebruikt worden, op de standaard voor invoer (de Excel invoersheet) vermeld staan.
- Uitleg:** Hier wordt niet voor gekozen. Omdat huidige en aanstaande gebruikers in een watersysteemanalyse vaak diverse vraagstukken behandelen, en diverse bronnen van gegevens hebben, bestaat de invoersheet uit een aantal verplichte kolommen die duidelijk zijn aangegeven, en een aantal andere kolommen. Met die andere kolommen kunnen de meest gebruikelijke gegevens rondom grote monsterdata-sets per monster behouden blijven. Bij de uitvoer van de ESF-toxiciteit Chemie rekentool blijven dergelijke invoerdata behouden. Daardoor kunnen, bijvoorbeeld, in Excel snel gemiddelde waarden van de toxische druk per jaar (trend in de tijd) of tussen waterlichamen in een beheersgebied (trends in de ruimte) worden berekend. Gebruikers kunnen, per geval, bekijken welke kolommen er nodig zijn en de rest negeren.

Invoergegevens – eenheden

- Opmerking:** Alle gemeten parameters die een rol spelen bij het berekenen van de mengsel-toxische druk van een mengsel worden uitgedrukt in eenheden, zoals $\mu\text{g/l}$ of mg/l . De macro-ionen zoals Ca, Mg, Na en Cl zouden in mg/L ingevoerd kunnen worden, terwijl nu de ESF-toxiciteit invoer als $\mu\text{g/l}$ gevraagd wordt. Bij het beoordelen van monstergegevens in de gebruikelijke kaders kunnen de eenheden dus anders zijn dan de in de ESF-toxiciteit tool gebruikte eenheden. Kan hiervoor automatisch gecorrigeerd worden (bv: omzetten van een parameter-meting uitgedrukt in mg/l naar de ESF-toxiciteit standaard voor die parameter uitgedrukt in $\mu\text{g/l}$)?
- Uitleg:** De ESF-toxiciteit Chemie tool lost deze toepassingsproblemen niet op, omdat er zo veel externe verschillen in gegevensbronnen en eenheden bestaan. De gebruiker dient goed te controleren dat de eenheden correct zijn. Uitgaan van één eenheid voor alle stoffen is hierbij de meest duidelijke oplossing.

Monstercodering

- Opmerking:** Moet de monstercode een plaats-jaar combinatie zijn?
- Uitleg:** Neen, de monstercode is vrij, zolang maar voorkomen wordt dat verschillende monsters dezelfde code krijgen. Alle gegevens van een monster moeten uiteraard dezelfde monstercode hebben. Dus: niet de concentratie-gegevens onder monstercode A, en overige parameters van dat monster onder monstercode B. Dergelijke verschillen kunnen wat betreft de ruwe data ontstaan, doordat verschillende (typen) parameters uit verschillende bronnen verzameld kunnen zijn. In dergelijke gevallen geldt dus: alle gegevens van één monster onder één code brengen, en dan invoeren in de tool.

Rapportage-grens

- Opmerking:** In de praktijk bestaat de data set voor veel toxische stoffen in een monster uit “<detectiegrens”. De concentratie is lager dan de grens die met apparatuur kan worden waargenomen. De vraag is: wat daarmee te doen?
- Uitleg:** De ESF-toxiciteit Chemietool rekent niet met invoergegevens die als “<detectiegrens” worden ingevoerd. De reden is in de voorgaande tekst uiteengezet. Zie paragraaf 2.3.4.



Resultaten – aantal significante cijfers

- Opmerking:** Het aantal significante cijfers in de uitvoer moet in verhouding staan tot de echte inhoud van de resultaten, en het is wenselijk dat de interpretatie-stap niet over-interpretiert.
- Uitleg:** De ESF- toxiciteit tool berekent de toxische druk van een stof of van een stoffenmengsel, en in de berekening en uitvoer kunnen verschillende aantallen ‘significante cijfers’ voorkomen. Op dit moment zijn die cijfers ‘puur numeriek’, en is het aan de gebruiker om aan het eind van de interpretatie de juiste keuze te maken, dat is: het juiste aantal significante cijfers te gebruiken in grafieken, tabellen en tekst.

Stofnamen, CAS-nummers, Aquo-codes

- Opmerking:** Eén van de belangrijkste dingen die moet gebeuren is: het invoeren en herkennen van de juiste stof. Daar zitten problemen in de identificatie, omdat geen van de gebruikte systemen die hiervoor (inter)nationaal beschikbaar zijn foutloos zijn, terwijl het maken van spelfouten in stofnamen/codes onherroepelijk leidt tot een mismatch in het “vinden” van de bedoelde stof in de ESF- toxiciteit Chemie tool.
- Uitleg:** Hier geldt de tip: gebruik alle opties die er zijn, zodat de juiste stof wordt gevonden, en meegewogen in de bepaling van de toxische druk. Als een stof gezocht wordt en op naam noch op CASnr. is te vinden, dan kan gezocht worden op de Engelse naam en/of IUPAC name. Voorbeeld: gezocht “tetrahydroftaalimide”, in de tool gevonden als (3aR,7aS)-rel-3a,4,7,7a-Tetrahydro-2-[(1,1,2,2-tetrachloroethyl)thio]-1H-isoindole-1,3(2H)-dione, met een ander CASnr. dan de Aquo-standaard lijst. Dit soort stof-identificatie problemen zijn een feit waar rekening mee gehouden moet worden. Kritisch blijven is de goede remedie.
- Een controle van de stofnamen (naam/spelling van een gemeten stof versus de naam in de Chemietool) hoeft vaak slechts eenmalig gedaan te worden, en kan plaatsvinden door in de Access tool de knop “Chemical names and codes” aan te klikken. Hierdoor worden 6006 records getoond (Access, rechterveld), die op allerlei wijzen doorzocht kan worden (via sorteren op Aquocode of stofnaam of CAS-nummer of via een “Find” functie).

Stoffen – aandacht voor specifieke stoffen

- Opmerking:** De rekentool berekent de toxische druk aan de hand van de invoergegevens. Die gegevens moeten daarbij duidelijk ‘slaan op’ wat er gemeten is, en wat bedoeld wordt. Soms is daar – vooral bij oudere monsters – een kans op onduidelijkheid. Voorbeelden zijn: (a) voeren we voor een metaal de totaalconcentratie in, of de gefiltreerde concentratie, of beide, en (b) voeren we wat betreft ammoniak/ammonia afzonderlijk NH_4 en NH_3 in, of de som NH_4NH_3 , of beide?
- Uitleg:** Verstand van zaken bij de gebruiker is cruciaal. Foute invoer levert foute uitvoer. De invoer moet weerspiegelen wat gemeten is, dus als de som NH_4NH_3 gemeten is, dan moeten de twee losse parameters NH_4 resp. NH_3 niet ook nog eens ingevoerd worden: de tool berekent dan de toxische druk uitvoer als afzonderlijke parameters, met als resultaat: dubbeltelling ammoniak/ammonia. NH_3 betekent alleen ongedissocieerd ammoniak. NH_4OH betekent alleen dissocieerbaar ammonium, inclusief de OH. Hier is op basis van molgewichten eenvoudig voor te corrigeren. NH_3 en NH_4OH mogen beide worden vermeld voor een enkel monster, maar beide mogen niet samen met NH_3NH_4 ingevoerd worden. Bij NH_3NH_4 wordt op basis van pH en T (temperatuur) een verdeling bepaald van het aandeel NH_3 als meest toxische, en het aandeel NH_4 dat ongeveer 500x minder toxisch is. Hier worden in de praktijk veel fouten gemaakt. Voor metalen moet duidelijk zijn welke fractie gemeten is, en welke ingevoerd wordt. Als concentraties na filtratie worden ingevoerd moet niet ook nog eens de totaalconcentratie zonder filtering worden ingevoerd.
- Het onderscheid T of F (Totaal of Filtered) is van groot belang bij de invoer van gegevens over stoffen. De T of F code kan teruggevonden worden op de worksheet “WaterConcentrationData”.



Stoffen – CAS nummers

- Opmerking:** CAS-nummers (<https://www.cas.org>) behoren uniek te verwijzen naar één chemische structuur, en ze worden als zodanig in de CAS-Registry (<https://cas.org/about-cas/cas-fact-sheets>) opgenomen voor wereldwijde toepassing als unieke en universele standaard voor het identificeren van stoffen. Echter, in de toepassing-databases waar de ESF-TOXICITEIT-Chemie tool op gebaseerd is blijkt dat de CAS nummers in verschillende bronnen niet uniek zijn, bijvoorbeeld Acetamiprid (CAS-Registry versus Chemietool versus RIVM website versus Aquo standaard).
- Uitleg:** Bij het ontwerp en de bouw van de ESF- toxiciteit Chemietool kunnen dergelijke verschillen in externe bronnen niet opgelost worden. De gebruiker van de Chemietool dient scherp op te letten dat problemen met stofnaam, CAS-nummer, enzovoorts, de berekeningen van de toxische druk niet onnodig 'storen' (bijvoorbeeld door een foute stofnaam-spelling, of een CAS-nummer probleem). De gebruiker dient de interpretatie van de resultaten te optimaliseren, door problemen van deze soort te traceren en waar mogelijk op te lossen.

Stoffen – metabolieten

- Opmerking:** Veel organische stoffen kunnen, na emissie en verspreiding in watersystemen, uiteenvallen in metabolieten, zoals methiocarbsulfoxide (metabool van methiocarb). Vaak bestaan er voor die metabolieten geen ecotoxicologische data. De vraag is dan: kan de Chemietool de ecotoxiciteit van de metabool berekenen door de gemeten concentraties van de metabool te beoordelen als gemeten concentraties van de moederstof (met als aanname, dat de ecotoxiciteit de metabool en de moederstof identiek zijn).
- Uitleg:** Dit is een speciaal geval van een andere vraag, zie "Stoffen – vergelijkbare stoffen". Het is denkbaar, dat we de aanname volgen, vanuit het oogpunt dat de netto uitslag (mengsel-toxische druk) dan dicht bij de werkelijke toxische druk zal worden berekend dan zonder de aanname, met als gevolg een betere rangordening van toxiciteit van alle monsters in de analyse. Immers: zonder toepassing van de aanname wordt de ecotoxiciteit van de metabool impliciet op "nul" gezet, wat waarschijnlijk vrijwel altijd kwantitatief onjuister zal zijn dan de aanname. Het is denkbaar, dat de ESF-toxiciteit Chemie tool uitgebreid wordt met een aantal moederstof-metabool combinaties, waardoor de onderschatting van toxische druk in deze gevallen geringer zal zijn, maar vooralsnog is besloten om deze keuzes aan de watersysteem-analist over te laten. Deze kan aan de hand van expertise en kennis handmatig de gekozen aanpak doorvoeren, en ook rapporteren. Bij risicobeoordelingen is het gebruikelijk en noodzakelijk dat de uitgevoerde handelingen en onzekerheden gerapporteerd worden, en dit is gewoon één van die dingen.

Stoffen – spelling van de stofnaam, of missend

- Opmerking:** Bij toepassing worden sommige stoffen waarvan de concentraties en naam gegeven worden niet gevonden, maar staan ze wel in de tool vermeld onder de chemische naam (voorbeeld: Acetamiprid).
- Uitleg:** Het is van groot belang om, als gebruiker, hier scherp op te zijn. Doordat de stofnamen vaak complex zijn (qua spelling), en/of doordat er op andere definities onduidelijkheden zijn (meerdere CAS-nummers voor één stof, zie CAS-nummers), moet de gebruiker altijd scherp controleren op volledigheid van de uitvoer ten opzichte van de invoer. Mist er een resultaat voor een stof, dan kan dat komen door een verschil in spelling, of door het gebrek aan toxiciteitsgegevens. De gebruiker moet zo nodig spelfouten corrigeren (invoersheet) en/of 'creatief zoeken' in de stoffentabel van de Chemie-tool. Namen van gemeten stoffen kunnen heel erg lijken op- maar niet gelijk zijn aan de stofidentificatie-opties van de Chemie-tool. De gebruiker controleert dan of de gemeten stof (naam) identiek is aan een Chemie-tool stof (naam), en zo ja: dan wordt de stofnaam op de invoersheet veranderd in de naam die de Chemietool hanteert: de uitslag is dan een correcte berekening van de toxische druk voor de gemeten stof. Andersom: de stofnaam kan gelijken maar niet gelijk zijn. De Chemietool moet dan niets berekenen voor de niet-gemeten stof. De gebruiker verwijdert zo nodig de metingen en hun incorrecte stofnaam, uit de invoersheet.



Stoffen – vergelijkbare stoffen

- Opmerking:** Er bestaan stoffen die qua spelling, molecuulstructuur en/of werkingsmechanisme sterk op elkaar lijken. Voorbeelden: fluazifop versus fluazifop-butyl, fluazifop-P-butyl, fluazifop-P. Dergelijke stoffen hebben uiteraard verschillende CAS-nummers, maar ze hebben min of meer dezelfde werking. De vraag die gesteld kan worden is: kan de Chemie-tool in dergelijke gevallen de gemeten concentraties van die stoffen omrekenen naar toxische druk, ook als er maar voor één van die stoffen een SSD afgeleid is? Kortom: kan de Chemie-tool geprogrammeerd worden zodanig dat je in deze gevallen een toxische druk kunt berekenen op basis van ‘meest gelijkende stof’ waarvoor ecotoxiciteitsgegevens bestaan?
- Uitleg:** Theoretisch is dit denkbaar. Er wordt zelfs momenteel al onderzoek naar gedaan: er wordt gewerkt aan het afleiden van een SSD voor stoffen op basis van de ecotoxiciteitsgegevens van andere stoffen. Het resultaat van dat werk is zeer belangwekkend. Immers: als de te ontwerpen werkwijze heel goed de toxiciteit van een stof blijkt te voorspellen, dan kunnen we het bestaande grote gegevens-hiaat over de toxiciteit van stoffen mogelijk grotendeels (voor dit doel) vullen. Dan kunnen we voor heel veel meer stoffen een mengsel-toxische druk behoorlijk goed bepalen. En dat kan dan weer leiden tot resultaten zoals “voor 7 van de gemeten 318 stoffen mag voor dit monster verwacht worden dat er een bijdrage is aan effecten op de biodiversiteit” in plaats van “voor 2 van de 318 stoffen weten we dat er een bijdrage is van die stoffen aan de effecten op de biodiversiteit, en voor 316 stoffen hebben we geen informatie”. Praktische invoering van dit principe vraagt om uitwerking van het verkennende onderzoek, en vervolgens (bij succes) een voldoende grondige uitwerking en toetsing, voorafgaand aan opname in de ESF- toxiciteit Chemie tool.

Ijzer en Aluminium

- Opmerking:** Bij toetsing van oude monsterdata bleek er vaak een bijzonder hoge PAF-waarde voor ijzer en aluminium berekend te worden. De reden daarvoor is nagegaan, en onder meer zijn vergelijkingen gemaakt met de resultaten van recente monsters.
- Uitleg:** Als ijzer en aluminium in niet-gefiltreerd water worden gemeten hebben de concentratie-metingen betrekking op “kleideeltjes”. In dat geval zouden Al en Fe uit de ESF-toxiciteit tool verwijderd kunnen worden. Tegelijkertijd zijn er ook in Nederland wateren waar zeker Fe wel degelijk toxisch kan zijn voor de soorten die voor de afleiding van de SSD’s van ijzer resp. aluminium getoetst zijn, zoals ijzerrijke beekjes. In de tool wordt op basis van de nu beschikbare kennis een zo goed mogelijke voorspelling gemaakt van de beschikbare Al en Fe concentraties, bij een gegeven totaalconcentratie. Er zitten verschillende ordegroottes tussen de totale concentratie en beschikbare concentratie. Een kleine afwijking in deze schattingen kan dan betekenen dat er toxiciteit wordt berekend terwijl dat niet met de praktijk overeenstemt. In dat geval is het óf kiezen om Al en Fe uit de dataset te verwijderen, óf Al en Fe in gefiltreerd water te analyseren en nogmaals te kijken. Dit is een voorbeeld waarbij de watersysteem-analist met verstand van zaken met de ESF-toxiciteit Chemie tool werkt. Kritisch, en met kennis van zaken, zoals de ‘valkuil’ die ontstaat door het bepalen van de toxische druk van “klei”.



Literatuur

- EPA, U. S. 2013. Aquatic life ambient water quality criteria for ammonia freshwater. . report no. EPA 822-R-13-001: 242., U.S. EPA, Office of Water. , Washington DC, USA.
- STOWA, 2016a. Posthuma, L., D. De Zwart, L. Osté, R. Van der Oost, and J. Postma. Ecologische Sleutelfactor Toxiciteit. Deel 1: Methode voor het in beeld brengen van de effecten van giftige stoffen in oppervlaktewater. rapport nr 2016- 15A, STOWA, Amersfoort, the Netherlands.
- STOWA, 2016b. Posthuma, L., D. De Zwart, R. Keijzers, and J. Postma. Ecologische Sleutelfactor Toxiciteit. Deel 2. Calibratie: toxische druk en ecologische effecten op macrofauna. rapport nr 2016- 15B, STOWA, Amersfoort, the Netherlands.



STOWA in het kort

STOWA is het kenniscentrum van de regionale waterbeheerders (veelal de waterschappen) in Nederland. STOWA ontwikkelt, vergaart, verspreidt en implementeert toegepaste kennis die de waterbeheerders nodig hebben om de opgaven waar zij in hun werk voor staan, goed uit te voeren. Deze kennis kan liggen op toegepast technisch, natuurwetenschappelijk, bestuurlijk-juridisch of sociaalwetenschappelijk gebied.

STOWA werkt in hoge mate vraaggestuurd. We inventariseren nauwgezet welke kennisvragen waterschappen hebben en zetten die vragen uit bij de juiste kennisleveranciers. Het initiatief daarvoor ligt veelal bij de kennisvragende waterbeheerders, maar soms ook bij kennisinstellingen en het bedrijfsleven. Dit tweerichtingsverkeer stimuleert vernieuwing en innovatie.

Vraaggestuurd werken betekent ook dat we zelf voortdurend op zoek zijn naar de 'kennisvragen van morgen' - de vragen die we graag op de agenda zetten nog voordat iemand ze gesteld heeft - om optimaal voorbereid te zijn op de toekomst.

STOWA ontzorgt de waterbeheerders. Wij nemen de aanbesteding en begeleiding van de gezamenlijke kennisprojecten op ons. Wij zorgen ervoor dat waterbeheerders verbonden blijven met deze projecten en er ook 'eigenaar' van zijn. Dit om te waarborgen dat de juiste kennisvragen worden beantwoord. De projecten worden begeleid door commissies waar regionale waterbeheerders zelf deel van uitmaken. De grote onderzoekslijnen worden per werkveld uitgezet en verantwoord door speciale programmacommissies. Ook hierin hebben de regionale waterbeheerders zitting.

STOWA verbindt niet alleen kennisvragers en kennisleveranciers, maar ook de regionale waterbeheerders onderling. Door de samenwerking van de waterbeheerders binnen STOWA zijn zij samen verantwoordelijk voor de programmering, zetten zij gezamenlijk de koers uit, worden meerdere waterschappen bij één en het zelfde onderzoek betrokken en komen de resultaten sneller ten goede van alle waterschappen.

DE GRONDBEGINSELEN VAN STOWA ZIJN VERWOORD IN ONZE MISSIE:

Het samen met regionale waterbeheerders definiëren van hun kennisbehoeften op het gebied van het waterbeheer en het voor én met deze beheerders (laten) ontwikkelen, bijeenbrengen, beschikbaar maken, delen, verankeren en implementeren van de benodigde kennis.

stowa