



Kennisnotitie

Berekening mengsel-toxische druk voor oppervlaktewateren bij immissietoetsen-Twee casussen

1. Inleiding

Immissietoetsen spelen een belangrijke rol bij het verlenen van vergunningen aan bedrijven die gevaarlijke stoffen lozen naar het milieu. Met deze toetsen worden de milieurisico's van een bedrijfslozing beoordeeld. Bij de immissietoets voor water vergelijkt men hiervoor de berekende of gemeten immissieconcentratie van een individuele stof in het ontvangende oppervlaktewater met de bijbehorende norm of risicogrens (MKN¹ of MTR²). De ratio tussen concentratie en norm wordt ook wel aangeduid als 'hazard quotient (HQ)'. Bij een HQ <1 is het risico van de stof naar verwachting verwaarloosbaar, maar bij een HQ >1 kunnen er risico's zijn.

Een beperking van de huidige immissietoets is dat de risico's van lozingsmengsels (hier cumulatie genoemd) nu veelal buiten beeld blijven. In het rapport "*Cumulatie ZZS en vergunningverlening (vervolgonderzoek 2023)*" (Bodar *et al.*, 2023) is de Hazard Index (HI) methode voorgesteld om te beoordelen wat de invloed is van 'onbedoelde'³ gezamenlijke lozingen van toxische stoffen' op de kwaliteit van oppervlaktewater. Deze HI is de optelsom van de HQ's van de afzonderlijke stoffen. Wanneer de HI-waarde <1 is, dan kunnen mengseleffecten als verwaarloosbaar worden beschouwd. Is de HI-waarde > 1, dan zijn mengseleffecten niet uit te sluiten. De HI-methode wordt beschouwd als een eerste conservatieve aanpak voor de beoordeling van mengsels, omdat de aanname geldt dat alle stoffen op dezelfde wijze effect hebben op organismen ('concentratie-additie'). Bij een HI >1 kan er dan ook aanleiding zijn om te kijken naar verfijningsmogelijkheden.

Naast de bovengenoemde aanname van concentratie-additie noemen Bodar *et al.* (2023) nog een ander belangrijk 'conservatisme' van de HI-methode. De gehanteerde normen of risicogrenzen zijn niet altijd gebaseerd op directe ecotoxiciteit, dus effecten op waterplanten en -dieren via de waterfase. Afhankelijk van de stof kunnen ze namelijk ook gebaseerd zijn op gezondheidkundige effecten bij de mens via visconsumptie, of op effecten bij vogels en zoogdieren door het eten van vis (doorvergiftiging). Dit maakt dat sterk uiteenlopende beschermdoelen worden opgeteld in de HI-methode. Ook dit leidt ertoe dat deze methode in principe een conservatieve, eerstelijns methodiek is om mengseleffecten te beoordelen, maar dat een verfijning nodig is als op basis hiervan een risico wordt voorspeld.

Ter illustratie zijn in het Bodar *et al.* (2023) rapport twee casussen (details: zie sectie 3) doorgerekend met de HI-methode. Hiervoor zijn alle individuele HQ's van de geloosde stoffen bij elkaar opgeteld voor een eerste inschatting van de mengselrisico's in het water. Dit is gedaan op de drie officiële toetspunten binnen de immissietoets: direct na de afvalwaterzuivering (het effluent), de zogenoemde mengzone (de directe omgeving van het

RIVM

A. van Leeuwenhoeklaan 9
3721 MA Bilthoven
Postbus 1
3720 BA Bilthoven
www.rivm.nl

T 088 689 89 89

Kenmerk:
KN-2024-0041
DOI:
10.21945/RIVM-
KN-2024-0041
Datum:
30 oktober 2024

¹ MKN: milieukwaliteitsnorm

² MTR: maximaal toelaatbaar risiconiveau

³ 'Onbedoeld' in tegenstelling tot 'bedoelde' mengsels, wanneer bijvoorbeeld een mengsel van stoffen onderdeel is van een product. Denk hierbij onder meer aan verf die uit meerdere componenten bestaat.

lozingspunt) en het waterlichaam dat zich verder benedenstrooms bevindt. Daarnaast is gekeken naar de achtergrondconcentraties⁴ van de geloosde stoffen, dus voordat de lozing plaatsvindt (bovenstrooms). Details zie: [Emissie-immissietoets | Informatiepunt Leefomgeving \(iplo.nl\)](#).

De uitkomsten toonden dat bij de achtergrondconcentraties de HI-waarden groter zijn dan 1. Dit houdt in dat mengseltoxiciteit van stoffen die al in oppervlaktewateren aanwezig zijn niet kan worden uitgesloten (Tabel 1). Verder was er na de lozing een verhoging van de HI-waarden te zien aan de rand van de mengzone en op waterlichaamniveau. De HI-waarde op het niveau van het waterlichaam was echter weer nagenoeg gelijk aan die van de achtergrond. Er is dus sprake van een duidelijke en sterke stijging van de HI bij lozingslocaties, waarna deze vervolgens weer daalt door verdunning in het watersysteem.

Tabel 1. Resultaten HI-methode van casussen 1 en 2 uit Bodar et al. (2023).

Casus	HI achtergrond	HI effluent	HI rand mengzone	HI waterlichaam
1	14,5	3347	16,5	14,7
2	13,9	1579	146,5	14,2

Als verfijning op deze uitkomsten van de conservatieve, eerstelijns HI-methode is in deze studie voor beide casussen de toxische druk van de stoffen in water berekend met de standaardmethodiek uit de STOWA [Sleutelfactor Toxiciteit](#). De toxische druk wordt daarbij uitgedrukt in de dimensie-loze eenheid Potentieel Aangetaste Fractie van soorten (PAF) voor enkelvoudige stoffen, of met de meer-stoffen PAF (msPAF) voor mengsels. Belangrijk kenmerk van deze maatlat is dat de uitkomsten direct verband houden met effecten op het waterleven: hoe hoger de msPAF in een situatie, hoe moeilijker het is om de natuurlijke biodiversiteit te handhaven of te herstellen. Anders gezegd: een hogere toxische druk betekent een lagere biodiversiteit.

N.B. Deze studie dient ter illustratie van de technische (on)mogelijkheden van het toepassen van de msPAF-methode bij de immissietoets water. Het gaat dus nadrukkelijk niet om een (her)beoordeling van de betreffende vergunningen.

2. Mengsel-toxische druk: msPAF

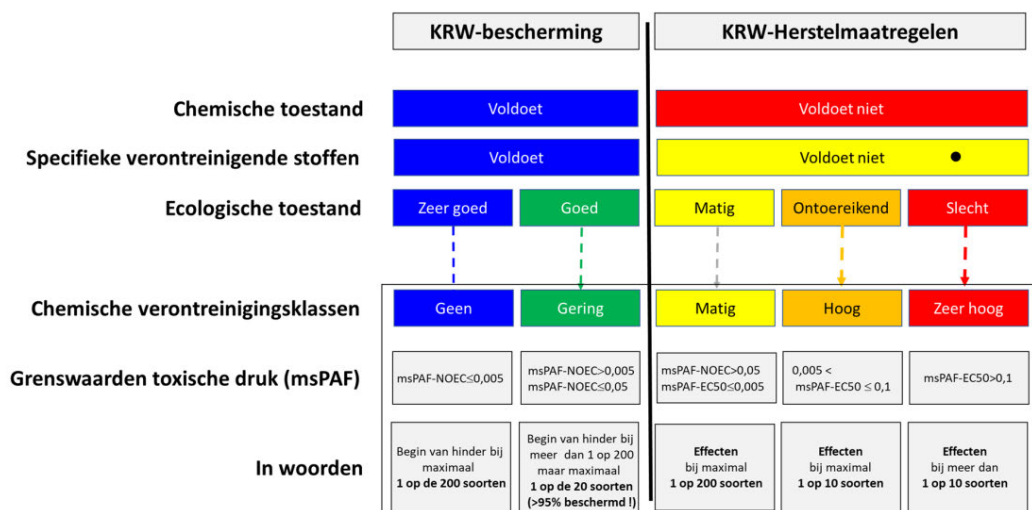
De msPAF is een maat voor de fractie van soorten die naar verwachting negatieve effecten ondervindt van het mengsel waaraan ze wordt blootgesteld. Deze berekening van de toxische druk richt zich op de mate van directe ecotoxiciteit en is dus niet van toepassing op de mens en op doorvergiftiging van vogels en zoogdieren. Voor de berekening van de msPAF wordt eerst de PAF per stof berekend. Om die te bepalen wordt de concentratie in het oppervlaktewater vergeleken met een soortgevoelighedsverdeling, de Species Sensitivity Distribution (SSD). De SSD beschrijft de variatie in gevoeligheid tussen soorten voor de desbetreffende chemische stof. De methode beoordeelt zowel chronische als acute effecten. Chronische SSDs zijn gebaseerd op No Observed Effect Concentrations (NOEC's) of EC₁₀-waarden, dit zijn de concentraties waarbij in ecotoxicologische experimenten geen, of 10% effect is waargenomen. Acute SSD's zijn gebaseerd op L(E)C₅₀-waarden, dit zijn de concentraties waarbij in testen 50% van de individuen sterft (LC₅₀) of 50% effect ondervindt (EC₅₀). De aanname bij SSDs is dat de gevoeligheid van soorten een log-normale verdeling heeft. Die verdeling wordt beschreven door twee parameters, μ en σ . De μ van een stof staat

⁴ Met achtergrondconcentraties worden de heersende concentraties bedoeld en niet de natuurlijke achtergrond.

voor (de log10 van) de concentratie waarbij een effect wordt verwacht op de helft van de aanwezige soorten. De σ van een stof vat samen wat de spreiding is in gevoeligheden tussen de soorten. De beide parameters samen bepalen de SSD en daarmee de PAF bij een milieuconcentratie van een stof. De individuele PAF's van de stoffen in het mengsel worden samengevoegd tot een msPAF. Daarbij is 'respons additie' het uitgangspunt, wat betekent dat de effecten (responsen) van individuele stoffen bij elkaar worden genomen. Daarbij geldt dat twee stoffen die, bijvoorbeeld, elk 50% effect hebben, een gezamenlijk effect hebben van 75%. De tweede stof heeft namelijk 50% effect op de overgebleven 50% van de soorten die effecten ondervindt van de eerste stof.

De verkregen msPAF's voor acute en chronische toxische druk kunnen worden geïnterpreteerd aan de hand van onderstaand schema (Figuur 1). Dit schema is afgeleid van de chemische normstelling voor stoffen volgens de Kaderrichtlijn Water (KRW) en de KRW-definitie van Ecologische Toestand. De msPAF's zijn ingedeeld in vijf klassen die zijn gekoppeld aan verschillende beschermingsniveaus. Een chronische msPAF-NOEC $\leq 0,05$ (5%) komt bijvoorbeeld overeen met een beschermingsniveau van 95% van de soorten en is gekozen als de grens van wat als 'goed' wordt beoordeeld. Dit percentage is een beleidsdoel dat van oudsher geldt als basis voor de normstelling van individuele stoffen.

Figuur 1. De beoordelingssystematiek binnen de STOWA Sleutelfactor Toxiciteit (Posthuma et al., 2023, zie www.sleutelfactortoxiciteit.nl). De mengsel-toxische druk is ingedeeld in vijf klassen die gekalibreerd zijn op de Ecologische Toestand, zoals gedefinieerd in de Kaderrichtlijn Water (KRW).



3. Werkwijze

3.1 Casussen

Casus 1 bestaat uit de immisietoets van een afvalverwerker die via een rioolwaterzuiveringsinstallatie van een waterschap loost op oppervlaktewater (Bredox B.V.). De vergunning betreft enkele tientallen stoffen, die elk individueel aan de immisietoets voldoen. De meeste stoffen voldoen niet aan de significantietoets, met een concentratieverhoging aan de rand van de mengzone van $\sim 9,9\%$ van de norm waar maximaal 10% is toegestaan. De casus kan hierdoor gezien worden als een 'stress-test' van deze stap binnen de immisietoets voor de bescherming tegen cumulatie van verschillende stoffen.

Casus 2 bestaat uit een immisietoets van meerdere bedrijven die via een centraal systeem uitkomen op een industriële waterzuivering (Sitech Services B.V.). De lozing op

het oppervlaktewater vindt uiteindelijk plaats via deze waterzuivering. Het betreft een groot aantal individuele stoffen, waarvan sommige individueel niet aan de immissietoets voldoen.

3.2 Berekening van toxische druk

Voor de berekening van de toxische druk en de msPAF-klassen is de [chemie rekentool](#) van de STOWA Sleutelfactor Toxiciteit gebruikt. De data van de immissietoetsen zijn hiervoor omgezet in het format zoals gespecificeerd in de [handleiding](#) van de rekentool (Dekker et al., 2021). Hierbij hebben we de drie toetspunten (effluent, rand mengzone, en KRW monitoringspunt/waterlichaam) en de achtergrond genomen als de locaties waarvoor de toxische druk van de aanwezige mengsels (msPAF-EC₅₀ en msPAF-NOEC) berekend is. Voor de verschillende stoffen zijn per locatie de concentraties ingevoerd zoals eerder berekend in de aan het RIVM verstrekte immissietoetsen. De aanname hierbij is dat die stoffen ook op hetzelfde moment in die verhouding aanwezig zijn. Dit sluit aan bij werkwijze van de immissietoets, die uitgaat van een jaargemiddelde vracht. Voor een aantal metalen voert de chemie rekentool een correctie uit voor de mate waarin de biobeschikbaarheid wordt beïnvloed door fysisch-chemische eigenschappen van het watersysteem, zoals zuurgraad, hardheid en opgelost organisch koolstof (DOC). De tool gebruikt hiervoor standaardwaarden die typerend zijn voor Nederlandse oppervlaktewateren.

We benadrukken dat we onze toxische druk berekeningen hebben uitgevoerd op basis van de concentraties zoals deze zijn berekend door derden in de oorspronkelijke immissietoetsen. Het RIVM heeft dus geen controle uitgevoerd op de juistheid van deze getallen. Dezelfde uitgangspunten golden overigens ook voor de eerder uitgevoerde HI-berekeningen.

3.3 Gevoeligheidsanalyse

Niet voor elke stof in de immissietoetsen van de casussen is een SSD beschikbaar. De chemie rekentool bevat 701 SSD's waarvan bepaald is dat ze van voldoende kwaliteit zijn voor het berekenen van effecten op het watermilieu. Een stof zonder SSD kan niet worden meegenomen in de standaard toxische druk-berekening. Het niet meenemen van deze stoffen geeft een onderschatting van het mengselrisico van de lozing. Deze onderschatting is hoger naarmate meer en lokaal belangrijke stoffen niet worden meegewogen. Om zicht te krijgen op de grootte van deze onderschatting, hebben we voor beide casussen gekeken voor hoeveel stoffen een SSD beschikbaar is in de chemie rekentool ten opzichte van het totaal aantal stoffen in de immissietoetsen.

Aansluitend is er een nadere gevoeligheidsanalyse uitgevoerd om voor de stoffen waarvoor geen SSD beschikbaar is in te schatten wat de bijdrage zou kunnen zijn aan de toxische druk van de mengsels. Hiervoor zijn allereerst de SSD's gebruikt uit Posthuma et al. (2019). Deze auteurs hebben in totaal voor 12.386 stoffen SSD's afgeleid en een kwaliteitsscore gegeven. De kwaliteitsscore van de SSD is gebaseerd op het aantal taxonomische groepen waarvoor gegevens beschikbaar zijn en het type ecotoxiciteitsgegevens. Een SSD op basis van experimentele data voor meer dan 10 taxonomische groepen wordt gezien als een SSD van de hoogste kwaliteit. Als voor een stof onvoldoende chronische NOEC's of EC₁₀-waarden beschikbaar zijn, kan de chronische SSD worden berekend met acute waarden waarop een extrapolatiefactor van 10 wordt toegepast. Ook kan 'read-across' worden toegepast⁵.

⁵ Read across: de informatie over de giftigheid van een 'data-arme' stof is verkregen uit gegevens van een vergelijkbare 'data-rijke' stof.

Voor meer detail over de afleiding van SSD's en de kwaliteitsscores verwijzen we naar de uitleg in het artikel van Posthuma et al. (2019).

Naast de SSD's uit Posthuma et al. (2019) zijn er 'surrogaat' SSD's afgeleid, door van deze SSD's het 5^e, 50^e en het 95^e percentiel van de μ te berekenen (Tabel 2). Deze drie μ 's beschrijven de situatie dat de stoffen zonder SSD relatief giftig zijn ten opzichte van de meeste stoffen, gemiddeld giftig zijn of minder giftig zijn. SSD's op basis van 5 of minder taxonomische groepen, read-across, of te onzekere extrapolatie (kwaliteitsscore voor extrapolatie van 5 of 6, zie Posthuma et al. (2019) zijn niet meegenomen in de berekening van deze 'surrogaat' SSD's. Voor de σ is de waarde van 0,7 gekozen, op basis van de standaardwaarde gehanteerd in Posthuma et al. (2019). Vervolgens zijn deze surrogaat SSD's gebruikt om verschillende scenario's door te rekenen voor de stoffen zonder SSD (Tabel 3).

Tabel 2. Waarden voor μ en σ gebruikt voor het afleiden van de 'surrogaat' SSD's. Uitleg: zie tekst.

Percentiel	μ EC50	σ EC50	μ NOEC	σ NOEC
5	1,3	0,7	0,26	0,7
50 (mediaan)	3,8	0,7	2,7	0,7
95	5,7	0,7	4,8	0,7

Tabel 3. Overzicht van de scenario's in de gevoeligheidsanalyse. Uitleg: zie tekst.

Scenario	Basis	Alle SSD's	Alle SSD's + 5 ^e percentiel 'surrogaat'	Alle SSD's + 50 ^e percentiel 'surrogaat'	Alle SSD's + 95 ^e percentiel 'surrogaat'
Gebruikt programma	Chemietool Sleutelfactor Toxiciteit	R	R	R	R
Gebruikte SSD's	Alleen beschikbare SSD's van hoge kwaliteit (701)	Alle 12.386, ongeacht kwaliteit	Alle, plus 'surrogaat' o.b.v. 5 ^{de} percentiel	Alle, plus 'surrogaat' o.b.v. 50 ^{ste} percentiel	Alle, plus 'surrogaat' o.b.v. 95 ^{ste} percentiel
Interpretatie Scenario	Alleen stoffen waarvan redelijk zeker is wat de invloed is op aquatische soortgemeenschappen zijn meegenomen in de berekening.	Ook stoffen waarvan minder zeker is wat de invloed is zijn meegenomen in de berekening	Wat als alle stoffen zonder SSD relatief giftig zijn vergeleken met de meeste stoffen?	Wat als alle stoffen zonder SSD redelijk 'gemiddeld' giftig zijn?	Wat als alle stoffen zonder SSD relatief minder giftig zijn dan de meeste stoffen?

De berekeningen zijn uitgevoerd met het computerprogramma R. Deze berekeningen zijn uitgevoerd door eerst de individuele PAF-waarde per stof te berekenen. Dit is gedaan met behulp van de pnorm() functie in R. Deze functie berekent de PAF voor een bepaalde concentratie van een stof op een locatie met behulp van de μ en σ van de SSD voor die stof of de 'surrogaat-waarden' uit Tabel 2. Voor de invoer van de concentraties van stoffen zijn de getallen omgezet naar log10, omdat SSDs lognormale verdelingen zijn (μ en σ zijn ook in log10). Vervolgens is per locatie de msPAF berekend met behulp van de prod() functie in R, die het product van alle getallen in een reeks getallen berekent,

volgens de formule $msPAF = 1 - \prod(1 - PAF_i)$. De R-scripts waarmee de berekeningen zijn gemaakt zijn beschikbaar op aanvraag bij het RIVM.

Zoals eerder genoemd corrigeert de chemie rekentool in het basisscenario voor de biobeschikbaarheid van een aantal metalen, maar dit gebeurt niet in de aanvullende scenario's van de gevoeligheidsanalyse.

4. Resultaten

4.1 Uitkomsten chemie rekentool van de Sleutelfactor Toxiciteit

De tabellen 4 en 5 laten de uitkomsten zien van de toxische druk berekeningen voor de casussen 1 en 2 in het basisscenario. Dit zijn de msPAF's die afgeleid zijn met SSD's van goede kwaliteit zoals beschikbaar in de chemie rekentool van de Sleutelfactor Toxiciteit. We benadrukken dat dit slechts een deel van de geloosde stoffen betreft (zie onder).

De achtergrondconcentraties van de geloosde stoffen veroorzaken in beide casussen geringe mengseleffecten, met een verwachte msPAF-NOEC van 2,1% voor casus 1 en 2,4% voor casus 2. Stroomopwaarts voldoet het mengsel dus aan het beschermdoel dat >95% van de soorten geen effecten ondervindt. De toxiciteit van het effluent is zeer hoog in casus 1: de msPAF-EC₅₀ bedraagt 51% en de msPAF-NOEC 98%. Dit betekent dat ruim de helft van de soorten >50% sterfte kan worden verwacht wanneer een ecosysteem zou worden blootgesteld aan deze concentraties en vrijwel alle soorten negatieve effecten ondervinden op de lange termijn. In casus 2 is de totale verwachte mengseltoxiciteit van het effluent lager, maar nog steeds hoog met een msPAF-EC₅₀ van 2,1% en een msPAF-NOEC van 24%. Omdat na lozing verdunning optreedt van het effluent, mag echter worden verwacht dat het uiteindelijke effect op waterorganismen in het ontvangende oppervlaktewater kleiner is.

In de immissietoets wordt rekening gehouden met deze verdunning door te toetsen aan de rand van de mengzone. Volgens de immissietoets mag een lozing niet leiden tot een normoverschrijding van een individuele stof aan de rand van de mengzone, én mag een individuele lozing niet leiden tot een verhoging in concentratie van meer dan 10% van de norm. In casus 1 voldeden alle stoffen aan deze stap. Ook is bij casus 1 de berekende mengsel-toxische druk gering aan de rand van de mengzone, met een msPAF-NOEC van 2,6% (Tabel 4). Hoewel dit lager is dan 5%, en daarmee aan het beschermdoel wordt voldaan, is er sprake van een verhoging van 0,55% ten opzichte van de msPAF-NOEC van de achtergrond. In casus 2 verslechtert de kwaliteit van het oppervlaktewater volgens Figuur 1 van 'gering' op de achtergrond naar 'matig' aan de rand van de mengzone; de msPAF-NOEC op de rand van de mengzone bedraagt 7,0% (Tabel 5). Hiermee wordt tot voorbij de rand van de mengzone niet voldaan aan het beschermdoel van geen effect voor >95% van de soorten. Op het monitoringspunt van het waterlichaam, verder weg van de lozing, is in casus 2 de toxiciteit na verdere verdunning weer gering en is er geen verschil met de toxische druk die al als achtergrond aanwezig is in het watersysteem. Dit in tegenstelling tot casus 1, waarbij op het monitoringspunt nog wel een geringe verhoging van de msPAF-NOEC wordt verwacht ten opzichte van de achtergrond (Tabel 4).

Tabel 4. De fractie soorten die naar verwachting negatieve effecten ondervindt door het geloosde mengsel bij casus 1. De waarden zijn per definitie een onderschatting, omdat alleen stoffen met een goede kwaliteit SSD zijn meegewogen.

Locatie	msPAF-EC ₅₀ [%]	msPAF-NOEC [%]	Chemische verontreinigingsklasse (zie Figuur 1)
Achtergrond	0,082	2,1	Gering
Effluent	51	98	Zeer hoog
Rand mengzone	0,11	2,6	Gering
Monitoringspunt waterlichaam	0,094	2,3	Gering

Tabel 5. De fractie soorten die naar verwachting negatieve effecten ondervindt door het geloosde mengsel bij casus 2. De waarden zijn per definitie een onderschatting, omdat alleen stoffen met een goede kwaliteit SSD zijn meegewogen.

Locatie	msPAF-EC ₅₀ [%]	msPAF-NOEC [%]	Chemische verontreinigingsklasse (zie Figuur 1)
Achtergrond	0,068	2,4	Gering
Effluent	2,1	24	Hoog
Rand mengzone	0,41	7,0	Matig
Monitoringspunt waterlichaam	0,068	2,4	Gering

4.2 Toxische druk van individuele stoffen

Het is ook mogelijk om met de chemie rekentool van de Sleutelfactor Toxiciteit te kijken naar de toxische druk van individuele stoffen (PAF). De tabellen 6 en 7 laten de individuele PAF zien van de top 3-stoffen met de hoogste chronische toxische druk aan de rand van de mengzone. In casus 1 zijn dit nikkel, zink en vanadium. Deze stoffen zijn goed voor 2,3% van de in totaal 2,6% berekende chronische toxische druk aan de rand van de mengzone, dus een aandeel van 89%. Voor casus 2 zijn de top 3-stoffen vanadium, nikkel en kobalt. Deze stoffen zijn goed voor 6,2% van de 7,0% berekende chronische druk aan de rand van de mengzone, eveneens een aandeel van 89%. Het grootste deel van de toxische druk van het mengsel wordt dus veroorzaakt door een klein deel van de stoffen. De top 3-stoffen met de hoogste individuele toxische druk van beide casussen zijn ook vertegenwoordigd in de top 10-stoffen met een bijdrage aan de totale HI (Tabel 9).

Tabel 6. De top 3-stoffen met de hoogste individuele chronische toxische druk (PAF) aan de rand van de mengzone in casus 1, en hun aandeel aan de totale chronische mengsel-toxische druk (msPAF).

Stof	PAF-NOEC [%]	msPAF-NOEC [%]
Nikkel	1,4	-
Zink	0,70	-
Vanadium	0,26	-
Top 3-stoffen	-	2,3
Alle stoffen (in rekentool)	-	2,6

Tabel 7. De top 3-stoffen met de hoogste individuele chronische toxische druk (PAF) aan de rand van de mengzone in casus 2, en hun aandeel aan de totale chronische mengsel-toxische druk (msPAF).

Stof	PAF-NOEC [%]	msPAF-NOEC [%]
Vanadium	3,8	-
Nikkel	1,9	-
Kobalt	0,64	-
Top 3-stoffen	-	6,2
Alle stoffen (in rekentool)	-	7,0

4.3 Dekking van het aantal stoffen met de msPAF rekentool

Het aantal stoffen waarvoor SSD's beschikbaar zijn in de chemie rekentool is een stuk lager dan het aantal stoffen waarvoor de vergunningen zijn verleend. In totaal zijn er in de rekentool SSD's voor 22 stoffen die voor één of beide casussen relevant zijn (Tabel 8). Voor casus 1 konden er in totaal 11 stoffen worden meegenomen in de berekening van de toxische druk op een totaal van 34 stoffen in de immisietoets (34%). Voor casus 2 waren dat er 20 op een totaal van meer dan 600 (minder dan 3,3%). Voor het merendeel van de stoffen kan de bijdrage aan de totale mengseltoxiciteit dus niet direct berekend worden met de msPAF-methode zoals beschikbaar in de chemie rekentool.

Tabel 8. Stoffen die relevant zijn voor een of beide casussen en waarvoor een SSD beschikbaar is in de chemie rekentool. Ter illustratie is ook vermeld of een stof een Zeer Zorgwekkende Stof (ZZS) is.

Stof met SSD in rekentool	AquoCode	CAS-nummer	Relevant voor casus 1	Relevant voor casus 2	ZZS
m-Xyleen	13xyln	108-38-3	Nee	Ja	Nee
1-Methylnaftaleen	1C1yNaf	90-12-0	Nee	Ja	Ja
Propylbenzeen	1C3yBen	103-65-1	Nee	Ja	Nee
2-Methylnaftaleen	2C1yNaf	91-57-6	Nee	Ja	Ja
Arseen	As	7440-38-2	Ja	Ja	Ja
Bifenyyl	biFy	92-52-4	Nee	Ja	Nee
Cadmium	Cd	7440-43-9	Ja	Ja	Ja
Gamma-hexachloorcyclohexaan	cHCH	58-89-9	Ja	Nee	Ja
Vinylchloride	C1C2e	75-01-4	Nee	Ja	Ja
Kobalt	Co	7440-48-4	Nee	Ja	Ja
Chroom	Cr	7440-47-3	Ja	Ja	Nee
Koper	Cu	7440-50-8	Ja	Ja	Nee
Bis(2-ethylhexyl)ftalaat	DEHP	117-81-7	Nee	Ja	Ja
Kwik	Hg	7439-97-6	Ja	Ja	Ja
Ammoniak	NH3	7664-41-7	Nee	Ja	Nee
Ammonium	NH4	14798-03-9	Nee	Ja	Nee
Nikkel	Ni	7440-02-0	Ja	Ja	Ja
Lood	Pb	7439-92-1	Ja	Ja	Ja
Tin	Sn	7440-31-5	Ja	Nee	Nee
Ureum	urum	57-13-6	Nee	Ja	Nee
Vanadium	V	7440-62-2	Ja	Ja	Nee
Zink	Zn	7440-66-6	Ja	Ja	Nee

Tabel 9 geeft voor beide casussen de top 10 van stoffen die het meest bijdragen aan de HI-waarde op het monitoringspunt in het waterlichaam en laat zien of die ook vertegenwoordigd zijn in de berekening van de msPAF met de chemie rekentool. Voor casus 1 betreft dit 5 van de 10 stoffen, voor casus 2 gaat het om 7 van de 10 stoffen. De berekening van de msPAF met de rekentool van de Sleutelfactor Toxiciteit leidt dus tot een (sterke) onderschatting van de totale mengseltoxiciteit; het daadwerkelijke effect op het aquatisch ecosysteem is zeer waarschijnlijk hoger dan het hier berekende effect. Hierbij moet worden aangetekend dat de HI in casus 2 sterk wordt bepaald door kwik en kobalt. Voor deze stoffen zijn de MKN's niet gebaseerd op directe ecotoxiciteit, maar op doorvergiftiging en gezondheidskundige effecten. Deze routes worden niet meegenomen in de msPAF, maar zijn wel belangrijk voor het bepalen van het effect van de lozing op de waterkwaliteit.

Tabel 9. Top 10-stoffen op basis van bijdrage aan de HI op het monitoringspunt waterlichaam, en of (ja/nee) deze konden worden berekend met de msPAF chemie rekentool. De stoffen zijn genoemd op volgorde van hun relatieve bijdrage aan de HI. De stof met de hoogste bijdrage staat bovenaan.

Casus 1	Casus 2
Vrij cyanide – nee	Kwik – ja
Zilver – niet in tool	Barium – niet in tool
Zink - ja	Kobalt – ja
Arseen – ja	Cadmium - ja
Koper - ja	Arseen – ja
Lithium – niet in tool	Ammonium - ja
Sulfaat – niet in tool	Zink – ja
Mangaan – niet in tool	Vrij cyanide – niet in tool
Nikkel - ja	Aluminium – niet in tool
Vanadium - ja	Vanadium - ja

4.4 Gevoeligheidsanalyse

De msPAF's zoals hierboven berekend met de chemie rekentool hebben alleen betrekking op de stoffen waarvoor SSD's van hoge kwaliteit beschikbaar zijn. De gevolgen van het niet meenemen van stoffen in de berekening van de toxische druk kunnen klein of groot zijn. Zo kunnen de belangrijkste stoffen zijn meegenomen, maar de 'missende' stoffen, dus zonder SSD in de rekentool, kunnen ook de belangrijkste blijken te zijn. Om hier inzicht te krijgen is een nadere gevoeligheidsanalyse uitgevoerd, waarbij ontbrekende stoffen op verschillende manieren zijn meegenomen in de evaluatie.

De tabellen 10 en 11 geven een samenvatting van de resultaten voor casus 1 en 2. Voor de achtergrond (stroomopwaarts) en het monitoringspunt van het waterlichaam, levert het meenemen van SSD's met een lagere kwaliteit een 10 maal hogere acute en chronische msPAF (tabellen 10 en 11, "Alle SSD's" scenario). Een verklaring hiervoor is dat er door het meenemen van SSD's van lagere kwaliteit meer stoffen meegenomen kunnen worden in de berekening, waardoor er in mindere mate sprake is van een onderschatting. Een kanttekening hierbij is wel dat door het meenemen van SSD's van lagere kwaliteit er ook juist een kans is op een overschatting van de toxische druk: de sterke verhoging kan komen door een klein aantal stoffen waarvoor de SSD door gebrek aan informatie toevallig een hoge toxische druk voorspelt, terwijl die in de werkelijkheid misschien lager uit zou vallen.

Naast de scenario's met beschikbare SSD's van hoge en lagere kwaliteit, zijn ook scenario's doorgerekend voor stoffen zonder SSD. Hiervoor zijn drie surrogaat-SSD's

gebruikt die de situatie beschrijven dat alle stoffen zonder SSD relatief giftig zijn, gemiddeld giftig zijn of minder giftig zijn dan de meeste stoffen (Tabel 10 en 11 aangeduid met respectievelijk 5^e, 50^e en 95^e percentiel scenario). De msPAF-waarden liggen in casus 1 op alle locaties op nagenoeg 100% voor het 5^e en 50^e percentiel scenario. Voor casus 2 is dit alleen het geval bij SSD's op basis van het 5^e percentiel scenario. Voor het minst conservatieve 95^e percentiel scenario wordt de toxiciteit uiteraard lager ingeschat, maar is deze nog steeds relatief hoog met een chronische msPAF van minstens 50% op elke locatie bij beide casussen.

De resultaten van de gevoeligheidsanalyse benadrukken dat de chemie rekentool van de STOWA [Sleutelfactor Toxiciteit](#) en de daarin beschikbare informatie een grote onderschatting geeft van de totale toxische druk van het mengsel. In dat opzicht wordt met de rekentool een 'ondergrens' van de mogelijke mengseleffecten in het water bepaald.

Tabel 10. Uitkomsten van de gevoeligheidsanalyse van casus 1. Uitleg: zie tekst.

Locatie/Scenario	Basis SSD's hoge kwaliteit	Alle SSD's	Alle SSD's + 5 ^e percentiel 'surrogaat'	Alle SSD's + 50 ^e percentiel 'surrogaat'	Alle SSD's + 95 ^e percentiel 'surrogaat'
Achtergrond	Acuut: 0,082% Chronisch : 2,1%	Acuut: 1,9% Chronisch : 23%	Acuut: 100% Chronisch: 100%	Acuut: 89% Chronisch: 100%	Acuut: 7,8% Chronisch: 56%
Effluent	Acuut: 51% Chronisch : 98%	Acuut: 100% Chronisch : 100%	Acuut: 100% Chronisch: 100%	Acuut: 100% Chronisch: 100%	Acuut: 100% Chronisch: 100%
Rand Mengzone	Acuut: 0,11% Chronisch : 2,6%	Acuut: 4,0% Chronisch : 29%	Acuut: 99,9% Chronisch: 100%	Acuut: 93% Chronisch: 100%	Acuut: 13% Chronisch: 66%
Monitoringspunt waterlichaam	Acuut: 0,095% Chronisch : 2,3%	Acuut: 2,9% Chronisch : 25%	Acuut: 100% Chronisch: 100%	Acuut: 91% Chronisch: 100%	Acuut: 10% Chronisch: 60%

Tabel 11. Uitkomsten van de gevoeligheidsanalyse van casus 2. Uitleg: zie tekst.

Locatie/Scenario	Basis SSD's hoge kwaliteit	Alle SSD's	Alle SSDs + 5 ^{de} percentiel 'surrogaat'	Alle SSD's + 50 ^{ste} percentiel 'surrogaat'	Alle SSD's + 95 ^{ste} percentiel 'surrogaat'
Achtergrond	Acuut: 0,0684% Chronisch : 2,4%	Acuut: 14,5% Chronisch : 53%	Acuut: 97,0% Chronisch: 100%	Acuut: 15,6% Chronisch: 66%	Acuut: 14,5% Chronisch: 53%
Effluent	Acuut: 2,10% Chronisch : 24%	Acuut: 43,2% Chronisch : 100%	Acuut: 100% Chronisch: 100%	Acuut: 98,9% Chronisch: 100%	Acuut: 53,2% Chronisch: 100%

Locatie/Scenario	Basis SSD's hoge kwaliteit	Alle SSD's	Alle SSDs + 5^{de} percentiel 'surrogaat'	Alle SSD's + 50^{ste} percentiel 'surrogaat'	Alle SSD's + 95^{ste} percentiel 'surrogaat'
Rand Mengzone	Acuut: 0,41% Chronisch : 7,0%	Acuut: 24% Chronisch : 71%	Acuut: 100% Chronisch: 100%	Acuut: 88% Chronisch: 100%	Acuut: 27% Chronisch: 80%
Monitoringspunt waterlichaam	Acuut: 0,0684% Chronisch : 2,4%	Acuut: 14,5% Chronisch : 53%	Acuut: 99,9% Chronisch: 100%	Acuut: 99,9% Chronisch: 82%	Acuut: 15% Chronisch: 53%

5. Discussie en conclusies

Deze studie laat zien dat de chemie rekentool van de Sleutelfactor Toxiciteit te gebruiken is bij de immissietoets water als verfijning van de HI-methode. De methode geeft inzicht in de mengsel-toxische druk die door een lozing ontstaat op het lozingspunt, in de mengzone en in het ontvangende oppervlaktewater. Om de tool technisch toe te passen, is in principe geen aanvullende informatie nodig ten opzichte van de huidige toetsuitvoering die zich richt op de individuele stoffen. Praktisch punt is wel dat de immissie-data eerst moeten worden omgezet naar een ander format. Daarnaast is het aantal stoffen met een betrouwbare SSD in de rekentool vooralsnog beperkt waardoor de uitkomst hoogstwaarschijnlijk een onderschatting van de mengsel-toxische druk geeft (zie onder).

De uitkomsten van de toxische druk berekeningen, de fractie van soorten die last ondervinden van het mengsel (msPAF), kunnen direct gerelateerd worden aan de verwachte invloed van de lozing op het water. De methode maakt zo de relatie inzichtelijk tussen de chemische verontreiniging en belemmeringen in het handhaven van een goede ecologische toestand (zie Figuur 1). Dit in tegenstelling tot de HQ- en HI-methode. Met deze methoden kan een (mengsel)risico wel worden uitgesloten (HQ of $HI < 1$), maar als effecten niet kunnen worden uitgesloten ($HI > 1$) is het niet mogelijk is om de mate van effecten verder te duiden. Daarentegen houdt de HI-methode wel rekening met stoffen die via accumulatie in vis kunnen leiden tot doorvergiftiging van vogels en zoogdieren of gezondheidskundige effecten bij de mens. Deze routes worden niet meegenomen in de msPAF, maar zijn wel belangrijk voor het bepalen van het effect van de lozing op de waterkwaliteit.

In beide casussen liet de HI-methode al een mengselrisico zien als gevolg van de achtergrondconcentraties (Tabel 1). De interpretatie van verdere verhogingen van de HI als gevolg van de lozingen is daarmee lastig. Met de msPAF-methode is het voor beide casussen wel mogelijk de achteruitgang in de ecologische kwaliteit van het oppervlaktewater inzichtelijk te maken en zijn de uitkomsten direct te koppelen aan beschermdoelen. Kanttekening hierbij is opnieuw dat dit alleen geldt voor de directe effecten op soorten in het aquatische systeem en niet voor de andere beschermdoelen mens en doorvergiftiging.

In casus 1 heeft het aanwezige mengsel naar verwachting een gering effect op waterorganismen met msPAF-waarden kleiner dan 5% op de drie toetspunten (stroomopwaarts, rand mengzone en waterlichaamniveau). In casus 2 zijn de msPAF's stroomopwaarts en op waterlichaamniveau ook kleiner dan 5%, maar op de rand van de

mengzone bedraagt de msPAF 7%. Dit in tegenstelling tot de conclusies met de HI-methode, waar de berekende HI-waarde bij de achtergrond dus groter dan 1 was. Een verklaring voor dit verschil kan zijn dat niet alle stoffen die in hoge mate bijdragen aan de HI ook mee zijn genomen met de msPAF benadering door een gebrek aan SSD's (Tabel 9). Bedenk hierbij ook dat de HI-methode gebruik maakt van risicogrenzen of milieukwaliteitsnormen die, afhankelijk van de beschikbare effectgegevens voor een stof, extrapolatie- of veiligheidsfactoren kunnen omvatten. Daarnaast houdt de normstelling en daarmee de HI-methode, ook rekening met de beschermdoelen doorvergiftiging en mens. Voor casus 2 kan het verschil te maken hebben met de relatief lage MKN's van kwik en kobalt. Dit zijn voorbeelden van stoffen waarbij doorvergiftiging en gezondheidkundige effecten bij de mens leidend zijn geweest bij de normaflleiding. We benadrukken dan ook dat de msPAF-aanpak niet gezien moet worden als een vervanging voor de normtoetsing van individuele stoffen of de HI-methode. Een geringe toxiciteit op basis van de msPAF-scores betekent dus niet direct dat er geen risico's kunnen zijn in het ontvangende water voor vogels en zoogdieren of de mens.

Voor de vergunningverlening is uiteindelijk van belang dat gedefinieerd wordt welke mate van invloed van het stoffenmengsel en op welke locatie, als onaanvaardbaar wordt beschouwd. Dit is een beleidsmatige keuze. In de immissietoets wordt op dit moment de concentratie van een individuele stof getoetst aan de norm aan de rand van de mengzone en mag de bijdrage van de lozing niet meer dan 10% van de norm omvatten. Dat laatste wordt gedaan om ook rekening te houden met lozingen van dezelfde stof vanuit meerdere bronnen op hetzelfde ontvangende water. Een grens voor mengseltoxiciteit die aan zou sluiten bij huidige beschermdoelen en de huidige immissietoets, zou een maximale chronische msPAF zijn van 5% aan de rand van de mengzone. Casus 2 met een chronische msPAF aan de rand van de mengzone van 7,0% (Tabel 5) zou daar niet aan voldoen. En hoewel casus 1 wel voldoet aan de grens van 5% chronische msPAF aan de rand van de mengzone, is de bijdrage ten opzichte van de achtergrond wel meer dan 10% (namelijk 24%, Tabel 4). Vanuit die insteek zou ook casus 1 niet voldoen op basis van mengseltoxiciteit. Zowel met de HI-methode als met de msPAF is de bijdrage van individuele stoffen inzichtelijk te maken (zie tabellen 6, 7 en 9). Dit geeft handelingsperspectieven om de toxische druk van het hele mengsel te beperken.

Hoewel de chemie rekentool van de Sleutelfactor Toxiciteit in principe goed te gebruiken is bij de immissietoets, blijkt wel dat de methode (nog) niet alle stoffen dekt. De reden is dat niet voor alle stoffen een SSD van voldoende kwaliteit beschikbaar is. De uitgevoerde gevoeligheidsanalyses, waarin we alle geloosde stoffen meenemen door middel van minder goede of 'surrogaat' SSD's, laten zien dat de lozingen in beide casussen kunnen leiden tot mengsels die lokaal zeer toxisch zijn voor het aanwezige waterleven. We benadrukken hierbij dat de resultaten met scenario's in de gevoeligheidsanalyse meer onzeker zijn dan de berekeningen met de chemie rekentool. We hebben immers aannames gedaan over de toxiciteit van stoffen waarvoor geen gegevens zijn. Ze laten vooral zien dat de toxische druk zoals berekend met de chemie rekentool zeer waarschijnlijk een onderschatting is van de daadwerkelijke mengseltoxiciteit, ook als de stoffen die niet in de tool zitten een relatief lage ecotoxiciteit zouden hebben.

Op dit moment is het RIVM bezig met het ontwikkelen van een voorspellingstool op basis van Machine Learning (ML) technieken die het mogelijk maakt om voor een 'nieuwe' stof een SSD te voorspellen. Deze ML-tool schat de ecotoxiciteit afhankelijk van stof-eigenschappen (chemische structuur, fysisch-chemische eigenschappen) en blootstellingsduur. Dit is gedaan voor 84 soorten die veel in standaard

ecotoxiciteitstesten worden gebruikt. Door de voorspellingen voor deze 84 standaardsoorten te combineren, kan een stof-specifieke SSD worden geschat. De bijbehorende μ - en σ -waarden kunnen vervolgens direct in de msPAF-methodiek worden ingevoerd. Dit is een meer geavanceerde methode dan de surrogaat SSD's op basis van percentielen zoals gebruikt in de gevoeligheidsanalyse van deze studie, omdat per stof een specifieke SSD wordt voorspeld op basis van de eigenschappen van die stof in plaats van dat een generieke aanname wordt gedaan over de giftigheid van alle onbekende stoffen. De eerste resultaten van de schattingen zijn al gepubliceerd (Viljanen et al., 2023) en zijn tussentijds gepresenteerd op onder meer het SETAC Europe congres (Wassenaar et al., 2024). Dergelijke voorspelde SSD's zouden in de toekomst kunnen worden toegevoegd aan de rekentool. De voorspellende waarde van de msPAF berekeningen zal daarmee op termijn groter zijn.

Bij zowel de HI-methode als de msPAF-methode worden de mengselrisico's bepaald door de *blootstelling* aan mengsels van stoffen te vergelijken met (verwachte) *effecten* op waterorganismen. De focus in deze studie lag bij het beter inschatten van de mogelijke *mengeffecten*, waarbij we de aanwezige waterconcentraties van de stoffen zoals aangereikt in de immissietoets als een gegeven hebben beschouwd. Deze concentraties kennen echter ook hun onzekerheden die doorwerken in de uitkomsten. Het gaat immers bij de immissietoets veelal om berekeningen op basis van gemiddelde vrachten in plaats van metingen, terwijl in werkelijkheid de combinaties van stoffen en hun concentraties kunnen variëren over de tijd. Deze blootstellingskant mag niet uit het oog worden verloren om de mengselrisico's in het ontvangende ecosysteem zo realistisch mogelijk te kunnen inschatten. We merken op dat in de huidige modelberekeningen van de waterconcentraties conservatieve aannames kunnen zitten, zoals het uitgaan van een lage afvoer in het ontvangende water. In de huidige studie is aangenomen dat alle stoffen op hetzelfde moment aanwezig zijn, ook dit is een conservatieve aanname. Aan de andere kant kan een achtereenvolgende blootstelling aan verschillende stoffen ook schadelijk zijn, als het ecosysteem tussendoor onvoldoende kan herstellen.

In het ontvangende water zijn ook stoffen aanwezig die niet worden geloosd door een specifiek bedrijf en die dus niet in de immissietoets worden meegenomen. Denk hierbij niet alleen aan andere industriële chemicaliën maar ook aan bestrijdingsmiddelen en (dier)geneesmiddelen. Deze stoffen vormen logischerwijs geen onderdeel van de msPAF-berekeningen in deze casestudies, maar ze zorgen al wel voor een zekere mate van toxische druk in het water. Dit houdt in dat de msPAF-berekeningen zonder het meenemen van deze stoffen altijd een onderschatting zullen geven van de totale mengseltoxiciteit in het betreffende water. Uit eerder onderzoek blijkt dat de totale mengseldruk op het aquatisch ecosysteem op meer dan 36% van de locaties in Nederland hoog is (Postma, 2021). We benadrukken dan ook dat een kaderoverstijgende aanpak met aandacht voor de effecten van mengsels essentieel is om uiteindelijk een goede waterkwaliteit te bereiken in Nederland. Het toepassen van de ms-PAF-methode bij immissietoetsen kan inzichtelijk maken wat lokaal de bijdrage is van industriële lozingen.

We wijzen tenslotte ook op de mogelijkheid van het inzetten van bioassays in geval van 'kritieke' uitkomsten met de chemie rekentool van de Sleutelfactor Toxiciteit.

Dankwoord

De auteurs danken de collega's van Rijkswaterstaat WVL en Leo Posthuma voor hun bijdragen aan deze notitie.

Literatuurlijst

Dekker, E., Slootweg, J., Koopman, R., Osté, L., & Posthuma, L. (2021). Protocol gebruik rekentool Chemie-spoor SFT2. Achtergronddocument beschikbare kennis bij de sleutelfactor Toxiciteit (Versie 1; KIWK-Toxiciteit Notitie). Kennis Impuls Water Kwaliteit. [Microsoft Word - 20211102 Protocol gebruik rekentool V0.5 \(sleutelfactortoxiciteit.nl\)](#)

Posthuma, L., Van Gils, J., Zijp, M. C., Van De Meent, D., & De Zwart, D. (2019). Species sensitivity distributions for use in environmental protection, assessment, and management of aquatic ecosystems for 12 386 chemicals. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 38(4), 905–917. <https://doi.org/10.1002/etc.4373>

Postma, J., Keijzers, R., Slootweg, J., & Posthuma, L. (2021). Toxiciteit van Nederlands oppervlaktewater in de jaren 2013-2018 (No. STOWA-nummer: 2021-43). STOWA. <https://www.stowa.nl/publicaties/toxiciteit-van-nederlands-oppervlaktewater-de-jaren-2013-2018#:~:text=jaren%202013%2D2018-,Toxiciteit%20van%20Nederlands%20Oppervlaktewater%20in%20de%20jaren%202013%2D2018,in%20en%20rond%20het%20water.>

STOWA. (n.d.). Aan de slag met de chemie-rekentool | sleutelfactor. Bezocht op 3 juli, 2024, <https://www.sleutelfactortoxiciteit.nl/verdieping/werken-met-het-chemiespoor/aan-de-slag-met-de-chemie-rekentool>

Viljanen, M., Minnema, J., Wassenaar, P. N. H., Rorije, E., & Peijnenburg, W. (2023). What is the ecotoxicity of a given chemical for a given aquatic species? Predicting interactions between species and chemicals using recommender system techniques. *SAR and QSAR in Environmental Research*, 34(10), 765–788. <https://doi.org/10.1080/1062936X.2023.2254225>

Wassenaar, P. et al. (2024). Forwarding maturation of Species Sensitivity Distributions using Machine Learning. Conference Poster. SETAC Europe 2024.