

# ▶▶ **Het Chemiespoor**

**KIWK Toxiciteit 12 oktober**

Tessa Pronk (KWR Water)

Slides opgesteld door: Leonard Osté (Deltares)

Werk van RIVM en Deltares

Home

# Verdieping

## Verdieping

- ▶ De vijf verontreinigingsklassen
- ▶ Toxische druk
- ▶ Wet- en regelgeving
- ▶ Wetenschappelijke publicaties

▶ **Werken met het Chemiespoor**

▶ Werken met het Bioassayspoor

## ►► Chemietool voor *status/impact* (in DPSIR):

### De stappen van het Chemiespoor en de chemie-rekentool

Op deze pagina leggen we de stappen uit die je moet zetten als je aan de slag gaat met het Chemiespoor en de bijbehorende rekentool.

► Lees meer

### Aan de slag met de chemie-rekentool

Op deze pagina lees je meer over het gebruik van de chemie-rekentool binnen het Chemiespoor, en kun je er ook mee aan de slag.

► Lees meer

### Chemiespoor: achterliggende principes en onderbouwing

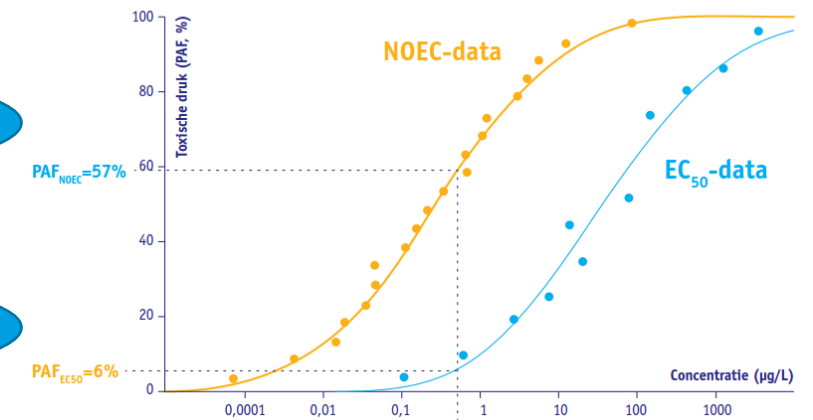
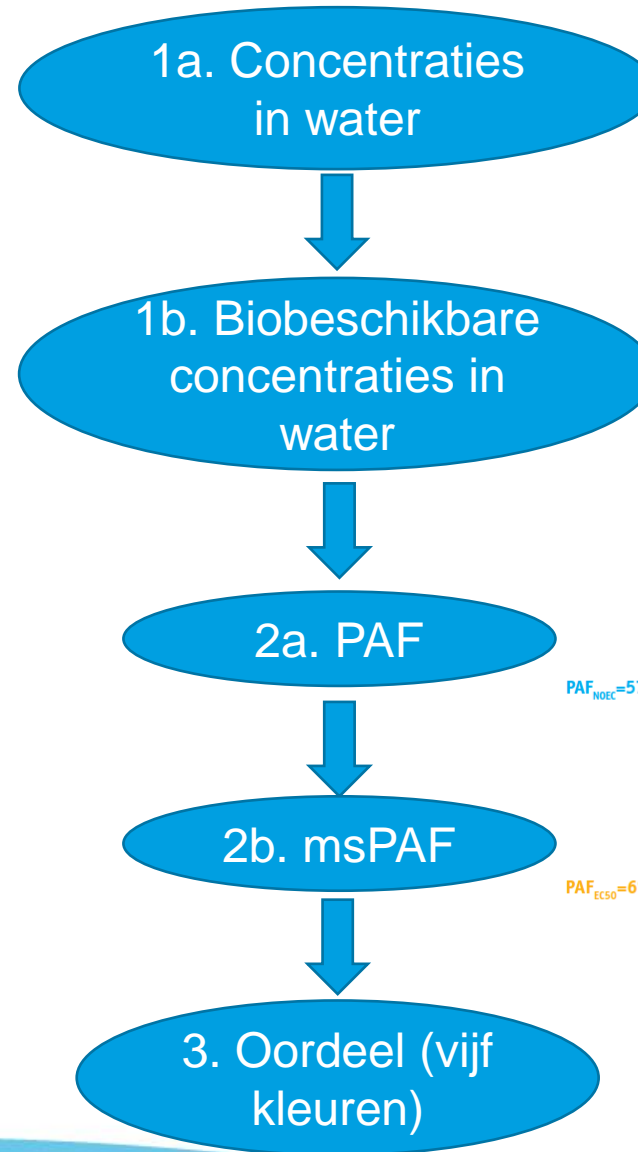
Op deze pagina leest u meer over de achterliggende principes van van het Chemiespoor plus de onderbouwing daarvan.

► Lees meer

## ►► Aanpak

Drie stappen:

1. Invoer van gegevens in de rekentool
2. Uitrekenen van de toxische druk van stoffen, stofgroepen en mengsels
3. Interpretatie



KRW-bescherming		KRW-herstel		
Zeer goed	Goed	Matig	Ontoereikend	Slecht

# 1. Invoer

## msPAF rekentool

Via deze rekentool kunt u de toxiciteit van wateren berekenen, hiervoor upload u een .csv bestand dat ten minste de volgende kolommen bevat: Meetobject.lokaalID, Resultaatdatum, Begindatum, Grootheid.code, Parameter.code, Parameter.CASnummer, Eenheid.code, Hoedanigheid.code, Limietsymbool, Numeriekewaarde. Nadat u een bestand heeft gekozen kunt u hier rechts de toxiciteit van het mengsel zien, welke stoffen dominant zijn en of u aan de kwaliteitsnorm voldoet. U kunt tussen de verschillende detailniveaus van de resultaten wisselen door op het menu onder 'resultaten' te klikken of door de resultaten te downloaden

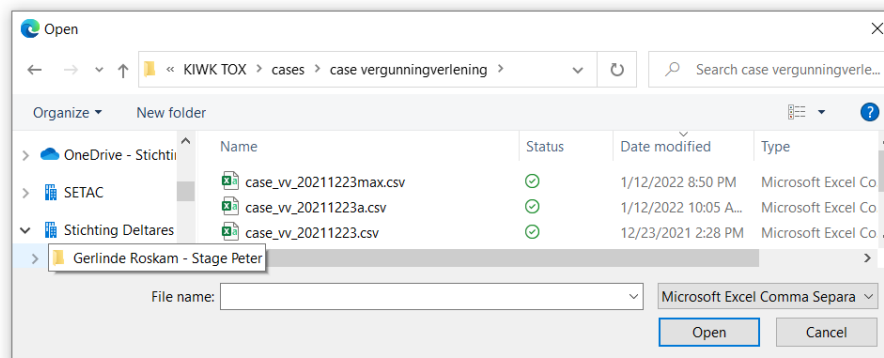
### Kies bestand

Browse... No file selected

### Resultaten

select an inputfile

Download



Invoer: csv-bestand  
(max. 5 MB)



Download de Handreiking voor het gebruik van de Chemie-rekentool



Download voorbeeld invoerfile Chemie-rekentool

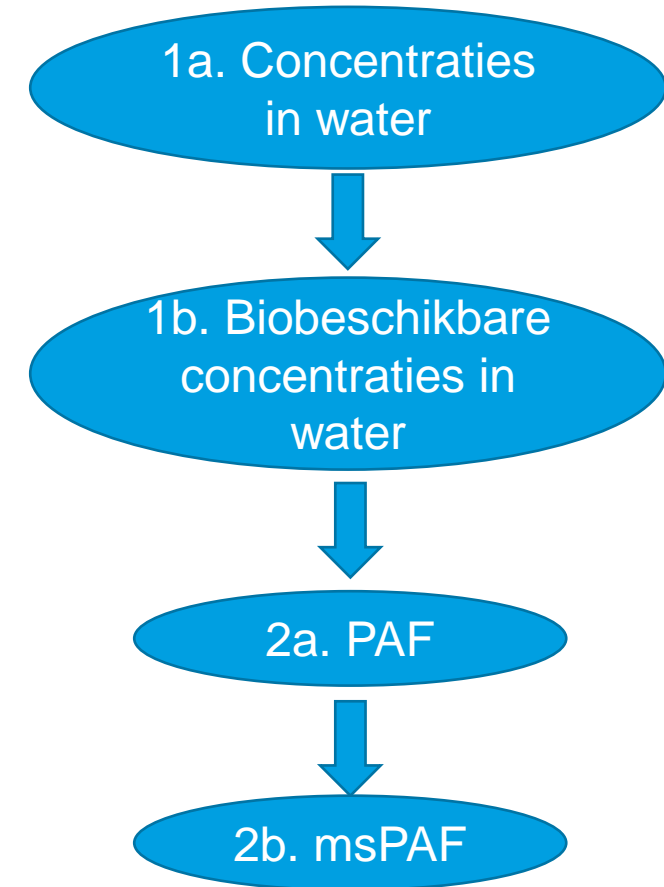
## ►► Invoerbestand Chemietool

- Minimaal aantal kolommen:
  - Meetobject.lokaalID: De identificatie waarmee de meetlocatie bekend is
  - Grootheid.code: Gebruikte waardes zijn: pH en T of Tw
  - Parameter.code: de Aquocode
  - Parameter.CASnummer: Het casnummer van de gemeten stof; Deze kolom wordt gebruikt als parameter.code niet herkend wordt of leeg is.
  - Eenheid.code: grootheid van de meting.
  - Limietsymbool: Rijen met een "<" of een ">" worden niet meegenomen
  - Numeriekewaarde: De waarde in deze kolom moet een getal zijn.
  - Begindatum: Begindatum van de monstername.
  - Resultaatdatum: Datum van de meting
  - Hoedanigheid.code: Hierin kunt u aangeven of de meting na filtering (nf) is of dat de eenheid alleen voor "P" of "N" geldt

## ►► 2. berekeningen

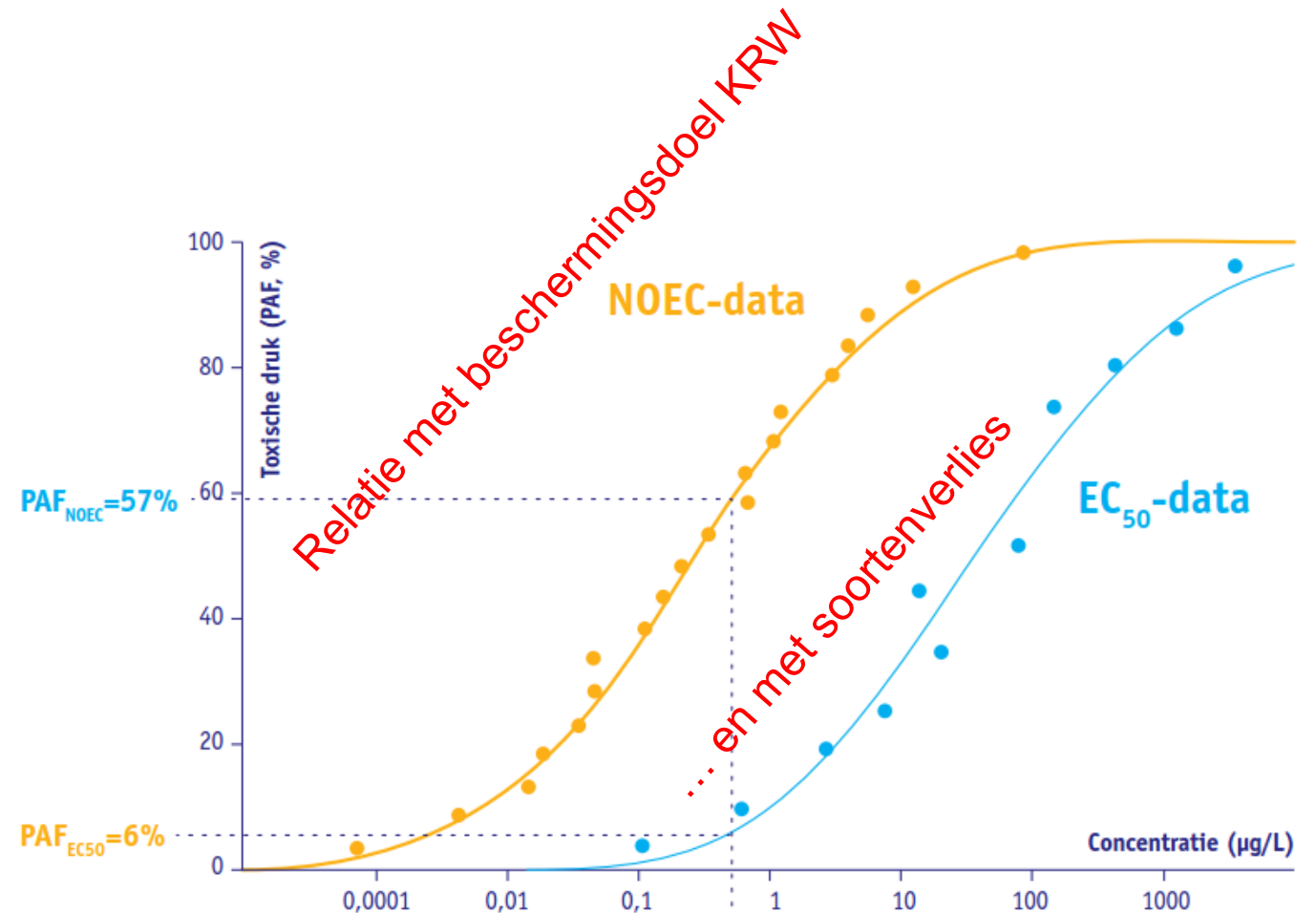
Berekenen biobeschikbare concentraties

- ZS-correctie voor organo's
- ZS + pH/DOC-correctie metalen
- Indien pH/ZS/DOC/Ca niet in het bestand, default-waarden:
  - Ca=100.000 µg/L,
  - pH=7,
  - DOC=5mg/l,
  - TSS 5 mg/L
  - POC 100.000 mg/kg (10%).



## ▶▶ PAF

- *Potentieel aangetaste fractie*
- Basis: curve effect per stof op meerdere toets-soorten
- Eindpunt: directe effecten op groei, reproductie, etc.
- PAF's per stof aggregeren tot (meer stoffen) toxische druk (msPAF)



ESFT2: twee curves (SSD) per stof



## ►► ‘Maatstreepjes vijf kleuren’

Chemische verontreinigingsklassen	Geen	Gering	Matig	Sterk	Zeer sterk
Grenswaarden toxische druk (msPAF)	msPAF-NOEC < 0,005	msPAF-NOEC < 0,05	msPAF-NOEC > 0,05 msPAF-EC50 < 0,005	0,005 < msPAF-EC50 < 0,1	msPAF-EC50 > 0,1
In woorden	Begin van hinder bij maximaal <b>1 op de 200 soorten</b>	Begin van hinder bij maximaal <b>1 op de 20 soorten</b>	<b>Effecten</b> bij maximaal <b>1 op 200 soorten</b>	<b>Effecten</b> bij maximaal <b>1 op 10 soorten</b>	<b>Effecten</b> bij meer dan <b>1 op 10 soorten</b>

## ►► Van Sleutelfactor 1 naar 2

Aspect	ESFTOX 1	SFT2
Kwaliteitsborging SSD's	Ca. 2000 (div. kwaliteit)	Ruim 1200 stoffen met goede kwaliteit. Ruim 11.000 stoffen met onvoldoende kwaliteit
Wat zegt het resultaat?	Interpretatie relatief (een locatie is erger dan andere)	Interpretatie relatief en absoluut (onderbouwing verbeterd o.b.v. 2 SSD's en ontwikkeld tot 5 kleuren)
Gebruiksgemak	Vrij lastige MS-Access tool Weinig uitleg	Gebruiksvriendelijke Website met link naar R-Tool met een R-Shiny gebruiksschil. Uitleg

## ▶▶ Uitvoerbestanden

Acht tabbladen:

- Warnings (waarschuwingen zoals verkeerd CAS nummer)
- SSDinfo (kwaliteit en dus inclusie)
- Input data (originele data invoer)
- ModFactors (factoren rond biobeschikbaarheid)
- PAF values (uitvoer, info PAF per stof)
- msPAF chronic (uitvoer, multi-stof PAF per sample)
- msPAF acute (uitvoer, multi-stof PAF per sample)
- msPAF qualitative (klassificatie)

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