

COMPUTERMODELLEN NIEUW HULPMIDDEL WATERZUIVERING

Het is ondoenlijk om voor elk nieuw stofje in drinkwaterbronnen of afvalwater te testen hoe dit stofje het beste verwijderd kan worden. Mogelijk bieden QSAR's uitkomst, nieuwe methoden waarmee statistisch verbanden tussen chemische eigenschappen van een stof en bijvoorbeeld zijn gedrag in zuiveringsinstallaties worden berekend. QSAR's staan nog in de kinderschoenen; er zijn vooral heel veel goed gedocumenteerde data nodig. KWR verkent de mogelijkheden voor een internationale database.

Als er onbekende stoffen in bijvoorbeeld drinkwaterbronnen voorkomen, leidt dat automatisch tot vragen. Vormen deze stoffen een risico voor het milieu of voor de gezondheid? En hoe moeten ze uit het water verwijderd worden? Voor elk nieuw stofje testen uitvoeren is echter veel te duur.

Hier kunnen 'big data' een alternatief zijn. Als je beschikt over een grote set data met chemische eigenschappen van moleculen en hun gedrag, kun je statistisch vaststellen welke eigenschappen corresponderen met welk gedrag. Bij een nieuw molecuul hoef je dan alleen informatie over zijn eigenschappen te verzamelen om te kunnen voorspellen hoe de stof zich zal gedragen.

Een dergelijke onderzoeksmethode, gebaseerd op het gebruik van computermodellen, wordt *in silico* genoemd, naar analogie van *in vivo* en *in vitro*. Zo'n statistische relatie tussen eigenschappen en gedrag noemt men een *Quantitative Structure Activity Relationship*, kortweg QSAR. Er zijn vele toepassingen van QSAR's denkbaar, maar vooral in de wereld van de waterzuivering zijn de verwachtingen hooggespannen. KWR Watercycle Research Institute organiseerde op 18 november 2014 een workshop met internationale experts.

GEDRAG VAN MOLECULEN

Eigenschappen die gebruikt kunnen worden voor QSAR's zijn molecuulmassa, molecuulstructuur, lading, oplosbaarheid en hydrofobiciteit (waterafstotendheid). Voorbeelden van gedrag zijn (eco)toxiciteit, hechting op bepaalde oppervlakken (bijvoorbeeld in ionenwisselaars) en het gedrag in zuiveringsprocessen zoals membraanfiltratie. Het idee is om zoveel mogelijk gegevens te verzamelen over zoveel mogelijk stoffen. Dat maakt het mogelijk om statistische verbanden te leggen. Zo wordt duidelijk welke eigenschappen welk gedrag beïnvloeden en hoe sterk die invloed is. Dit wordt samengevat in een wiskundig model (de QSAR). Om de toepasbaarheid en de betrouwbaarheid van dit model in te schatten is validatie nodig. Dat gebeurt bij voorkeur met data die onafhankelijk verkregen zijn, dus niet uit de verzameling gegevens komen die gebruikt is om het model te maken.

MINDER DIERPROEVEN

In de Europese regelgeving voor chemische stoffen (de REACH-verordening) zijn de risico's voor mens en milieu van een stof bepalend voor de toelating. De hoop is dat QSAR's in de toekomst verbanden kunnen leggen tussen de moleculaire structuur van een stof en bijvoorbeeld zijn giftigheid voor de mens of voor waterorganismen. Het aantal benodigde dierproeven kan dan sterk omlaag (een REACH-doelstelling). Er is echter nog niet zoveel bekend over het verband tussen eigenschappen van moleculen en hun risico's; er zijn ook nog maar weinig modellen die zulke verbanden kunnen aantonen. Ook is het moeilijk om data los te krijgen van bijvoorbeeld de farmaceutische industrie.

QSAR'S BIJ WATERZUIVERING

Bij het toepassen van QSAR's in de waterzuivering zijn in principe twee strategieën mogelijk. Allereerst is er de black-box-benadering. Bij nanofiltratie bleek bijvoorbeeld het molaire volume van een stof een belangrijke eigenschap te zijn. Er werden prima voorspellingen verkregen, maar die waren alleen geldig voor één type membraan in één bepaalde watermatrix. Tegenover de beperkte toepasbaarheid staat het voordeel dat zulke QSAR's niet zoveel data vereisen en relatief eenvoudig te bepalen zijn.

In de 'grey-box-benadering' wordt geprobeerd het mechanisme van een proces te begrijpen. Bekend was al dat de molecuulgrootte van een stof bepalend kan zijn voor de verwijdering ervan door nanofiltratie of omgekeerde osmose. Toepassing van QSAR's maakte duidelijk dat ook de hydrofobiciteit (de mate waarin een stof waterafstotend is) een behoorlijke invloed heeft. Evenzo gaven QSAR's waardevolle informatie over de factoren die een rol spelen bij zuivering door actieve kool. Een grey-box-benadering is meer werk, maar de betrouwbaarheid is hoger.

TOEKOMSTMUZIEK

QSAR's zijn veelbelovend maar nog lang geen realiteit. Daarvoor is een database nodig met gedocumenteerde gegevens

over zoveel mogelijk chemische stoffen. Het opzetten en samenstellen daarvan vereist internationale samenwerking, waarbij onderzoeksgroepen over de hele wereld data leveren en gebruik maken van de database om hun eigen QSAR's te maken en/of te valideren. Pas dan kan de toepassing een ware vlucht nemen. KWR gaat de mogelijkheden verkennen om zo'n database te realiseren.

Roberta Hofman
(KWR)

Jan Peter van der Hoek
(Waternet, TU Delft)

Een uitgebreide versie van dit artikel is te lezen door gebruik te maken van de QR-code of te kijken op www.vakbladh2o.nl



SAMENVATTING

Voortdurend duiken nieuwe stoffen op in bijvoorbeeld afvalwater. Het is ondoenlijk om voor elke nieuwe stof apart vast te stellen wat de risico's zijn, en hoe hij verwijderd moet worden. Een veelbelovend alternatief zijn QSAR's: statistische verbanden tussen chemische eigenschappen van moleculen en hun gedrag, bijvoorbeeld giftigheid, gedrag in rioolwaterzuiveringen milieueffecten. Bij QSAR's worden die verbanden met computermodellen vastgesteld op basis van grote hoeveelheden data. Bij een nieuw molecuul is dan alleen informatie over die eigenschappen nodig om het gedrag van de stof te voorspellen. Vooral in de wereld van de waterzuivering zijn de verwachtingen ten aanzien van van QSAR's hoog.