



Bedrijfstakonderzoek
BTO 2023.011 | December 2023

Verkennd Onderzoek: Waterkwaliteit meewegen in milieu-impactanalyses

Rapport

BTO 2023.011 | December 2023

Dit onderzoek is onderdeel van het collectieve Bedrijfstakonderzoek van KWR, de waterbedrijven en Vewin.

Opdrachtnummer

402045-258

Projectmanager

Jolijn van Engelenburg

Opdrachtgever

BTO - Verkennd onderzoek

Auteurs

Tessa van den Brand en Renske Hoondert

Kwaliteitsborgers

Milou Dingemans, Roberta Hofman

Verzonden naar

Dit rapport is verspreid onder BTO-participanten.

Een jaar na publicatie is het openbaar.

Keywords

Lifecycle Analysis; waterkwaliteit

Jaar van publicatie
2023

Meer informatie

Dr. ir. Tessa van den Brand
T 030-6069629
E tessa.van.den.brand@kwrwater.nl

PO Box 1072
3430 BB Nieuwegein
The Netherlands

T +31 (0)30 60 69 511
E info@kwrwater.nl
I www.kwrwater.nl

KWR

December 2023 ©

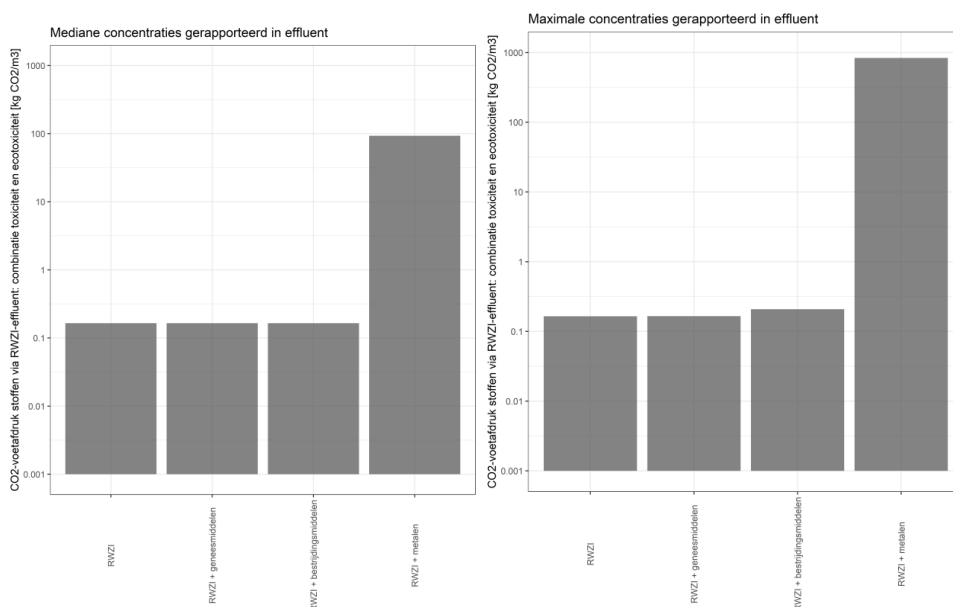
Alle rechten voorbehouden aan KWR. Niets uit deze uitgave mag - zonder voorafgaande schriftelijke toestemming van KWR - worden verveelvoudigd, opgeslagen in een geautomatiseerd gegevensbestand, of openbaar gemaakt, in enige vorm of op enige wijze, hetzij elektronisch, mechanisch, door fotokopieën, opnamen, of enig andere manier.

Managementsamenvatting

Meewegen van waterkwaliteit bij milieu-impactanalyses complex maar noodzakelijk

Auteurs: Tessa van den Brand en Renske Hoondert .

De milieu-impact van (nieuwe) technologieën in de behandeling van water wordt doorgaans getoetst op basis van informatie over de infrastructuur en het energie- en chemicaliëngebruik. Daarbij blijft de (beoogde) verbetering van de chemische waterkwaliteit en daarmee de inperking van humane toxiciteit en ecotoxiciteit nog buiten beschouwing. Hierdoor ontstaat een onvolledig beeld van de milieu-impact van de zuiveringsinstallatie en is de uitkomst eigenlijk niet bruikbaar voor de evaluatie van waterbehandelingsystemen. Verkennd onderzoek heeft laten zien dat wel meewegen van de impact van (verminderde) emissie door zuivering zorgt dat een behoorlijk aandeel (tot 5000% in het geval van metalen) van de totale milieu-impact niet meegewogen wordt. Hierdoor ontstaat dus een onvolledig beeld van de milieu-impact en is de uitkomst niet bruikbaar voor een goede evaluatie en kosten-batenanalyse van waterbehandelingssystemen. Hoewel de hier voorgestelde methode om een waterkwaliteitsvoetafdruk te berekenen nog erg complex is, pleit bovenstaande ervoor om niet langer alleen beleid te voeren op basis van klimaatneutraliteit (op basis van de reductie van energie en chemicaliënverbruik), maar ook de waterkwaliteitsvoetafdruk van de verwijdering van stoffen uit het effluent mee te wegen.



Milieu-impact RWZI Amsterdam West (uitgedrukt in CO₂-equivalenten) bij het meenemen van waterkwaliteitsimpact in de levenscyclusanalyse, inclusief de invloed van individuele stofgroepen (geneesmiddelen, bestrijdingsmiddelen en metalen), gebaseerd op mediane concentraties in effluent (links) en gebaseerd op maximale concentraties in effluent (rechts).

Belang: waterkwaliteitsverbetering door zuivering nog amper meegenomen in milieu-impactstudies

In milieustudies naar de behandeling van water wordt op dit moment de impact van de verwijdering van stoffen op de chemische kwaliteit van het oppervlaktewater zelden meegewogen, vooral omdat van veel stoffen die via het effluent in het milieu komen nauwelijks informatie beschikbaar is over hun milieu-impact. Milieustudies wegen wel de energieconsumptie en het chemicaliëngebruik tijdens de behandeling mee, maar niet de milieuwinst door een lagere emissie van schadelijke stoffen. Hierdoor ontstaat een onvolledig beeld van de humane toxiciteit, ecotoxiciteit en milieu-impact van de zuiveringsinstallatie. Dit maakt de uitkomst van milieustudies eigenlijk onbruikbaar voor evaluatie van waterbehandelingsystemen.

Aanpak: mogelijkheden meewegen waterkwaliteit in milieu-impactstudies onderzocht

Verkend is met welke methoden deze milieuwinst zo inzichtelijk te maken is dat hij kan worden meegewogen in een milieu-impactanalyse van waterbehandelingsystemen. In dit verkennend onderzoek is de milieu-impact van stoffen bepaald met twee milieu-effectbeoordelingsmethoden: ReCiPe 2016 en USEtox 3.0. Deze methoden worden vaak gebruikt om scenario's te vergelijken in de watersector, onder meer toegepast in een casus voor de RWZI van Amsterdam-West.

Resultaten: meenemen van individuele stoffen in effluent maakt bepaling impact RWZI volledig

De methoden ReCiPe 2016 en USEtox 3.0. zijn toegepast en beschreven is welke data essentieel zijn om de karakterisatiefactoren te berekenen voor stoffen, specifiek bestrijdingsmiddelen. Uit deze

inventarisatie bleek dat de impact op de waterkwaliteit, de waterkwaliteitsvoetafdruk, een substantieel deel kan uitmaken van de totale impact van de RWZI. De uitkomsten van de berekeningen laten zien dat het achterwege laten van zulke berekeningen bij het bepalen van de milieu-impact zorgt dat een behoorlijk aandeel (tot 5000% in het geval van metalen) van de totale milieu-impact niet meegewogen wordt. Hierdoor ontstaat dus een onvolledig beeld van de milieu-impact en is de uitkomst niet bruikbaar voor een goede evaluatie en kosten-batenanalyse van waterbehandelings-systemen. Meenemen van de invloed van (de afname van) individuele stoffen in de berekening van de milieu-impact is belangrijk voor een goede evaluatie en kosten-batenanalyse van waterbehandelingssystemen.

Toepassing: neem waterkwaliteit op in LCA-studies

De hier voorgestelde methode om de waterkwaliteitsvoetafdruk te berekenen is nog erg complex, maar de grote impact van het effect van verwijdering van individuele stoffen pleit ervoor om het beleid niet langer alleen te voeren op grond van klimaatneutraliteit (door reductie van energie en chemicaliënverbruik), maar ook de waterkwaliteitsvoetafdruk en de (verminderde) impact op de waterkwaliteit door waterbehandeling mee te wegen. Het is daarbij belangrijk de stakeholders (zoals RWZI-beheerders) zorgvuldig mee te nemen in deze paradigmaverschuiving, maar ook handvatten te bieden om dit in te bouwen in de besluitvorming.

Rapport

Dit Verkennd onderzoek is beschreven in het rapport *Verkennd Onderzoek: waterkwaliteit meewegen in milieu-impactanalyses* (BTO 2023.011).

Inhoud

Rapport	2
<i>Managementsamenvatting</i>	3
Inhoud	5
1 Introductie	7
2 Theorie achter milieu-impact: methodieken	10
2.1 Effectbeoordelingsmodel: USEtox 3.0	11
2.1.1 Humane toxiciteit (carcinogene en non-carcinogene toxiciteit)	11
2.1.2 Ecotoxiciteit (zoetwater)	15
2.2 Effectbeoordelingsmodel: ReCiPe 2016-methode	17
2.2.1 Humane toxiciteit (carcinogene en non-carcinogene toxiciteit)	17
2.2.2 Ecotoxiciteit (zoetwater)	19
2.3 Verschillen en overeenkomsten USEtox en ReCiPe2016	20
2.4 Omrekenen effecten naar CO ₂ -impact	23
3 Vergelijken karakterisatiefactoren voor humane toxiciteit en ecotoxiciteit berekend met ReCiPe en USEtox voor bestrijdingsmiddelen, geneesmiddelen en zware metalen.	24
3.1 Methode vergelijken resultaten ReCiPe en USEtox	24
3.1.1 Carcinogene toxiciteit	24
3.1.2 Non-carcinogene toxiciteit	24
3.1.3 Zoetwaterecotoxiciteit	25
3.2 Bestrijdingsmiddelen	25
3.2.1 Carcinogene toxiciteit	25
3.2.2 Non-carcinogene toxiciteit	26
3.2.3 Zoetwaterecotoxiciteit	27
3.3 Geneesmiddelen	28
3.3.1 Carcinogene toxiciteit	28
3.3.2 Non-carcinogene toxiciteit	29
3.3.3 Zoetwaterecotoxiciteit	29
3.4 Zware metalen	30
3.4.1 Zoetwaterecotoxiciteit	30

4	Uitdrukken milieu-impact geneesmiddelen in CO ₂ -equivalenten	32
4.1.1	Berekening milieu-impact	32
4.1.2	Toegepast in een casus	34
4.1.3	Betekenis	Error! Bookmark not defined.
5	Conclusies en perspectief	39
6	Referenties	43
I	Bijlage	45

Definitielijst

Ecopunten: in een life cycle assessment (LCA) worden milieueffecten meegenomen, waarbij de milieu-impact wordt berekend in zogeheten 'ecopunten'. 1.000 Ecopunten komen overeen met de milieu-impact van één West-Europeaan in één jaar.

Transferfracties: de fractie van een stof die zich van het ene milieucompartiment naar het andere compartiment beweegt.

Impactcategorieën: impactcategorieën zijn indicatoren gegroepeerd in één categorie. Elke impactcategorie heeft zijn eigen gedefinieerde indicatoren en vertegenwoordigt een specifiek milieuthema.

Innamefactor (IF): een vermenigvuldiging van de blootstellingsfactor (de externe blootstelling van de mens aan een stof) en de fractie van de concentratie daarvan die daadwerkelijk door de mens wordt opgenomen en mogelijk voor gezondheidseffecten zorgt.

Karakterisatiefactoren: karakterisatiefactoren drukken uit hoe sterk de bijdrage van een kilo van een bepaalde stof aan de humane gezondheid is (in vergelijking met de bijdrage van één kilo van een referentiestof).

Midpunten en eindpunten: binnen de twee geëvalueerde LCA-modellen worden milieueffecten op twee niveaus beschouwd: midpunt en eindpunt. Midpunten geven de bijdrage van de RWZI voor een specifiek milieueffect aan (in ons geval humane toxiciteit en ecotoxiciteit). Eindpunten worden gedefinieerd als de uiteindelijke schade op de natuurlijke omgeving (biodiversiteit), humane gezondheid en grondstoffenuitputting, die wordt veroorzaakt door de verschillende milieueffecten op midpuntniveau.

Milieu-impactanalyse: ook wel LCA (levenscyclusanalyse) genoemd, waarin de kosten en baten van de implementatie van producten op basis van diverse impactcategorieën worden beoordeeld.

Referentiestof: een stof waarvan de toxiciteit bekend is en die ter referentie dient voor de toxiciteit van andere stoffen.

1 Introductie

Van veel stoffen, die via het water in het milieu terechtkomen, is nauwelijks informatie beschikbaar over de milieu-impact. In milieustudies naar de behandeling van water wordt de chemische kwaliteit van het water daardoor zelden (volledig) meegewogen. De energieconsumptie en het chemicaliëngebruik tijdens de waterbehandeling wordt meegewogen, maar de milieuwinst, door minder emissie van een schadelijke stof, niet. In dit onderzoek verkennen we methoden om deze milieuwinst inzichtelijk te maken op een zodanig manier dat deze meegewogen kan worden in een milieu-impactanalyse, bijvoorbeeld bij de beoordeling van de implementatie van een nieuwe zuiveringstap. Een specifieke uitdaging daarbij is dat er (heel) veel stoffen zijn die geëmitteerd worden naar het milieu (Posthuma et al., 2019). Voor enkele van deze stoffen is reeds een milieu-impact vastgesteld, voor vele anderen nog niet (Huijbregts et al., 2005). Bovendien worden er regelmatig nieuwe stoffen geproduceerd of in het milieu aangetroffen.

Milieueffecten kunnen in een milieu-impactanalyse op verschillende manieren worden berekend en op verschillende manieren worden uitgedrukt. Door de jaren heen zijn verscheidene methoden ontwikkeld om de milieu-impact te bepalen op basis van diverse impactcategorieën, welke worden gekozen aan de hand van de context van de milieu-impactanalyse. Hierbij kan bijvoorbeeld gedacht worden aan impactcategorieën zoals eutrofiëring (uitgedrukt in kg PO₄/N – equivalenten), toxiciteit (uitgedrukt in DALY/kg geëmitteerde stof (toxiciteit) en verlies in biodiversiteit per kg geëmitteerde stof (ecotoxiciteit), maar ook aan energiebehoefte en ozondepletie (Sustainability, 2020). De milieu-impact van (nieuwe) technologieën in de behandeling van water wordt doorgaans getoetst op basis van informatie over de infrastructuur en het energie- en chemicaliëngebruik en laat de (beoogde) verbetering van de chemische waterkwaliteit en daarmee inperking van humane toxiciteit en ecotoxiciteit buiten beschouwing. Dit is zeer relevant omdat veel antropogene stoffen niet volledig worden verwijderd door de rioolwaterzuiveringsinstallaties (RWZI's) en zo dus in de waterketen terechtkomen (Golovko et al., 2021). Milieu-impact kan op verschillende manieren worden vastgesteld; de CO₂- en watervoetafdruk zijn hier voorbeelden van (bijvoorbeeld Huijbregts et al. (2016)). Er zijn verschillende milieu-impactmethodieken beschikbaar die kunnen worden toegepast om deze impact te bepalen, zoals ReCiPe, die ook indicatoren (en impactcategorieën) als particulate formation (de vorming van deeltjes), ecotoxiciteit en menselijke gezondheid meeneemt (Acero et al., 2014). Stikstof en fosfaat kunnen in enkele methoden worden meegewogen om de milieu-impact van een waterzuivering te bepalen, zoals ReCiPe en USEtox. Voor medicijnen en zeer zorgwerkkende stoffen (ZZS) is dit helaas (nog) niet het geval (Fantke et al., 2017; Huijbregts et al., 2016).

In dit verkennend onderzoek hebben we ons gericht op het meewegen van de beoogde waterkwaliteitsverbetering in de beoordeling van milieu-impact van stoffen via twee effectbeoordelingsmethoden; ReCiPe 2016 en USEtox 3.0. Dit zijn de methodieken die vaak worden gebruikt om scenario's te vergelijken in de watersector (Rebello et al., 2020). Met deze methodieken kan een vertaling worden gemaakt van fysisch-chemische eigenschappen van een stof naar een innamefactor (de daadwerkelijke blootstelling) voor de mens en dier en kan het toxische effect en de uiteindelijke potentiële schade die de stof aanricht op mens en in het milieu ingeschat worden, mits informatie beschikbaar is over de toxiciteit van de stof. Tijdens het onderzoek vergeleken wij de milieu-impactmethodieken (ReCiPe 2016 en USEtox 3.0) en hebben we onderzocht waar de grootste verschillen in resultaten tussen deze methodieken vandaan komen. Daarnaast beschrijven wij in dit rapport hoe de invloed van stoffen op de waterkwaliteit kan worden uitgedrukt in CO₂-equivalenten.

Het is bij het bepalen van de milieu-impact van stoffen belangrijk om de systeemgrenzen van de analyse goed te definiëren. Als stoffen niet meer geëmitteerd worden via het effluent, kan het immers gebeuren dat deze stoffen via

een andere route nog wel het milieu bereiken; zoals concentraatstromen bij membranen en de verwerking van het slib van RWZI's. De milieu-impact van geëmitteerde stoffen wordt ook sterk bepaald door het milieucompartiment waarin geloosd wordt; het effect van emissie naar het compartiment bodem of zee is heel anders dan naar zoetwater. Deze aspecten worden nader behandeld in de discussie.

Er zijn drie stofgroepen geselecteerd die in casestudies verder worden uitgelicht.

1. Bestrijdingsmiddelen
2. Geneesmiddelen
3. Zware metalen

2 Theorie achter milieu-impact: berekenen van karakterisatiefactoren.

De humane toxiciteit (HTP; Human Toxicity Potential) van een stof wordt in milieu-impactanalyse in beide methoden (ReCiPe 2016 en USEtox) uitgedrukt in disability-adjusted life years (DALY) per kg geëmitteerde stof het aantal jaar dat verloren gaat ten gevolge van ziekte, handicap of vroege dood. Hierbij wordt onderscheid gemaakt tussen kankerverwekkende en niet-kankerverwekkende stoffen (Fantke et al., 2017; Huijbregts et al., 2016). Ecotoxiciteit wordt typisch uitgedrukt in potentiële aangetaste fractie soorten (PAF) per kg geëmitteerde stof en zegt dus in feite iets over de aantasting van de biodiversiteit (Fantke et al., 2017; Huijbregts et al., 2016). Karakterisatiefactoren (characterization factors; CF), welke aangeven hoeveel een standaardhoeveelheid van een stof bijdraagt aan een bepaald milieueffect, voor deze impactcategorieën kunnen worden berekend op basis van een viertal, individueel berekende, factoren: de *fate*factor (FF), blootstellingsfactor (XF), effectfactor (EF) en schadefactor (DF) (Zie formule 1).

$$CF = FF * XF * EF * DF \quad [1]$$

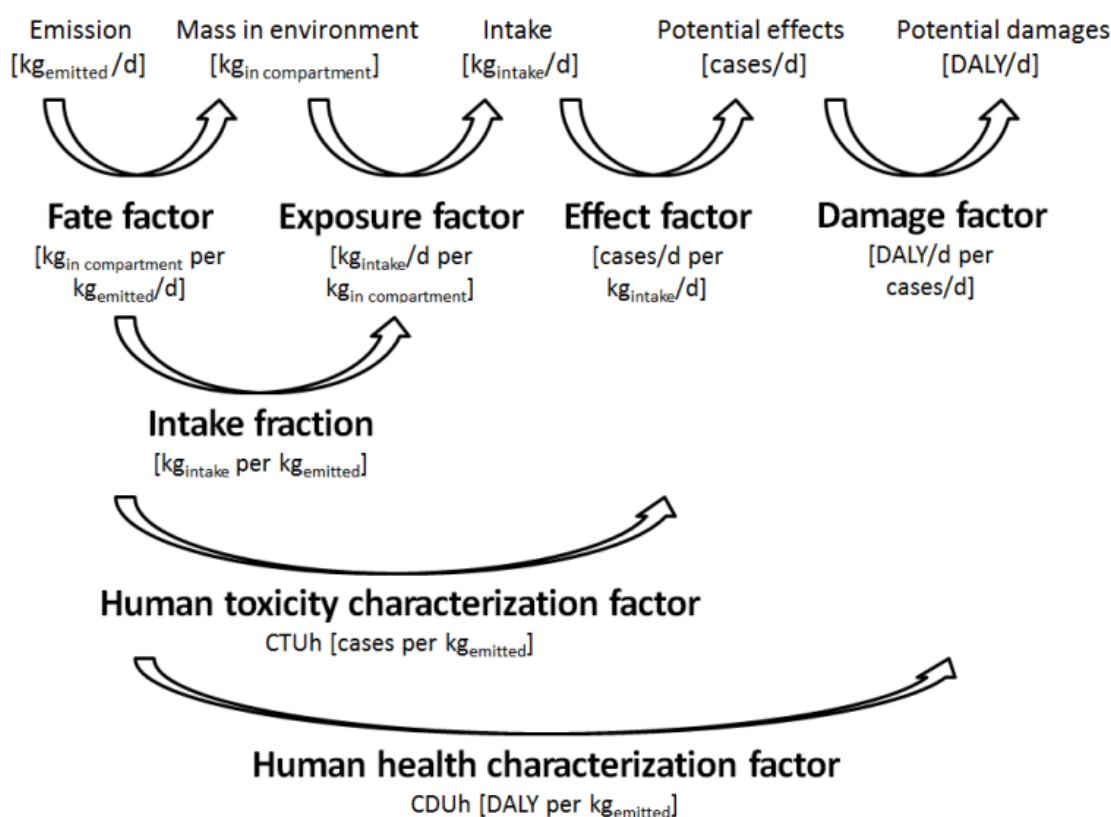
Voor humane toxiciteit en ecotoxiciteit zijn deze factoren eenvoudig onafhankelijk van elkaar te berekenen via twee methoden: het USEtox consensusmodel (Fantke et al., 2017) en de ReCiPe-methode (Huijbregts et al., 2016). Het berekenen van deze karakterisatiefactoren wordt in de onderstaande hoofdstukken verder toegelicht. In dit hoofdstuk verdiepen we ons in deze methoden en beschrijven we welke data essentieel zijn om de karakterisatiefactoren te berekenen voor stoffen, waarbij we ons specifiek richten op bestrijdingsmiddelen, met als uiteindelijk doel om de verminderde milieu-impact door gedeeltelijke zuivering van deze stoffen door RWZI's in te kunnen schatten.

2.1 Effectbeoordelingsmodel: USEtox 3.0

USEtox berekent karakterisatiefactoren voor humane toxiciteit en (aquatische) ecotoxiciteit zoals beschreven in respectievelijk Figuur 1 en 2. In onderstaande paragrafen zijn deze methodieken verder uitgewerkt.

2.1.1 Humane toxiciteit (carcinogene en non-carcinogene toxiciteit)

In USEtox wordt de toxische potentie van stof x (HTP_x of CDU_h in Figuur 1; in ziektegevallen per kg geëmitteerde stof) bepaald door de innamefractie (IF; de *fatefactor* (FF) vermenigvuldigd met een blootstellingsfactor (XF)) te vermenigvuldigen met een effect factor (EF) voor alle blootstellingsroutes (Figuur 1 en vergelijking 2).



Figuur 1: Visuele weergave van het emissie-naar-schade-raamwerk voor de humantoxicologische impact van stoffen, zoals gebruikt in USEtox (Fantke et al., 2017).

Inname

Inname van een stof door een mens kan op drie verschillende manieren plaatsvinden, via drie verschillende blootstellingsroutes; inhalatie (waarbij in USEtox onderscheid wordt gemaakt tussen stedelijke gebieden en landelijke gebieden), ingestie (via drinkwater, dierlijke producten, vis en gewassen (ondergronds en bovengronds)) en via opname door de huid (bijvoorbeeld voor pesticiden). Inname via inhalatie is afhankelijk van transport van de stof tussen de milieucompartimenten (zoals het luchtcompartiment binnenshuis) en de mens. Karakterisatiefactoren zijn afhankelijk van onder andere enkele fysisch-chemische eigenschappen van de stof (bijvoorbeeld sorptiecoëfficiënt

en degradatiesnelheden) en het volume van de ruimte binnenshuis. Voor Europa wordt in USEtox een gemiddeld huisvolume gerapporteerd van 209 m³ en een standaardinhalatiesnelheid van 13 m³/dag. Inname via drinkwater wordt berekend gebaseerd op onder andere een dagelijkse innamefactor. Er wordt uitgegaan van een inname van 1,4 liter gezuiverd oppervlaktewater per dag. Dit is minder dan de drinkwaterinname die standaard wordt gebruikt bij toxicologische risicobeoordelingen (van der Aa et al., 2013). Drinkwater op basis van grondwater wordt in deze versie van USEtox nog niet meegenomen. De berekende inname van een stof via voedsel wordt gebaseerd op onder andere een bioaccumulatiefactor (BAF; in hoeverre wordt een stof vastgelegd in het vlees, zuivel of groente). Deze factoren zijn essentieel in het berekenen van de innamefactoren en kunnen eventueel uit EPI SuiteTM worden gehaald (U.S. EPA, 2012). Om de opname van een stof in een plant te berekenen wordt gebruikgemaakt van een specifiek model, zoals beschreven in Rosenbaum et al. (2011).

Data over specifieke fysisch-chemische eigenschappen van stoffen zijn essentieel om de *fate*factoren voor deze stoffen te kunnen berekenen in USEtox (Tabel 1). Het betreft hier informatie over het moleculair gewicht van een stof, de pKA-dissociatieconstanten, de octanol-water partiticoëfficiënt, de organisch koolstof-water partiticoëfficiënt, dampdruk, wateroplosbaarheid, en diverse degradatiesnelheden in water, lucht, sediment en bodem (Fantke et al., 2017). Tevens is informatie nodig over transferfracties van stoffen vanaf de rioolwaterzuiveringsinstallaties naar lucht en water, gebaseerd op, onder andere, sorptie van de stof aan slib en vervluchtiging van de stof. Voor stoffen waarvoor deze parameters niet beschikbaar zijn, bieden QSAR-modellen (kwantitatieve structuur-activiteitsrelaties – statistische modellen) of deterministische/mechanistische modellen, beiden standaard ingebouwd in USEtox, of externe software zoals EPI SuiteTM uitkomst. Deze kunnen gebruikt worden voor het schatten van degradatiesnelheden, transferfracties en – zeer sporadisch – voor (eco)toxiciteitsgegevens.

Tenslotte kan informatie over het producttype interessant zijn om ook consumentengebruik mee te nemen in de analyse, aangezien een aanzienlijk deel van de blootstelling van mensen aan chemische stoffen via het gebruik van consumentenproducten, waarbij het product direct op de huid wordt gesmeerd, plaatsvindt (Douziech, 2019). USEtox neemt directe blootstelling aan stoffen mee in de milieu-impactbeoordelingen door gebruik te maken van product-type-specifieke compartimenten (Fantke et al., 2021).

Tabel 1: Benodigde informatie voor onbekende stoffen om meegenomen te kunnen worden in USEtox.

	Parameter	Omschrijving
Fysisch-chemische parameters	MW	Molecuulgewicht in g.mol ⁻¹
	K _{ow}	Octanol-waterpartitiecoëfficiënt in L.L ⁻¹
	K _{oc} (optioneel)	Organisch-koolstof-waterpartitiecoëfficiënt in L.Kg ⁻¹
	K _H 25C	Henry's law constante bij 25°C in Pa.m ³ .mol ⁻¹
	Pvap25	Dampdruk bij 25°C in Pa
	Sol25	Wateroplosbaarheid bij 25°C in mg.L ⁻¹
	KdegA	Degradatie in lucht in s ⁻¹
	KdegW	Degradatie in water in s ⁻¹
	KdegSd	Degradatie in sediment in s ⁻¹
	KdegSl	Degradatie in bodem in s ⁻¹
Transferfracties	AirU	Transferfractie naar lucht (via EPI Suite™)
	Fr.waterC	Transferfractie naar zoetwater (via EPI Suite™)
	Nat.soilC	Transferfractie naar bodem (via EPI Suite™)
Toxiciteitsdata	ED50 _{inh.noncanc}	De dosis die een mens in diens leven via <u>inhalatie</u> binnen moet krijgen om (non-carcinogene) ziekte met 50% toe te laten nemen in kg.leven
	ED50 _{ing.noncanc}	De dosis die een mens in diens leven via <u>ingestie</u> binnen moet krijgen om (non-carcinogene) ziekte met 50% toe te laten nemen in kg.leven
	ED50 _{derm.noncanc}	De dosis die een mens in diens leven via <u>de huid</u> binnen moet krijgen om (non-carcinogene) ziekte met 50% toe te laten nemen in kg.leven
	ED50 _{inh.canc}	De dosis die een mens in diens leven via <u>inhalatie</u> binnen moet krijgen om kankergerelateerde ziekte met 50% toe te laten nemen in kg.leven
	ED50 _{ing.canc}	De dosis die een mens in diens leven via <u>ingestie</u> binnen moet krijgen om kankergerelateerde ziekte met 50% toe te laten nemen in kg.leven
	ED50 _{derm.canc}	De dosis die een mens in diens leven via <u>de huid</u> binnen moet krijgen om kankergerelateerde ziekte met 50% toe te laten nemen in kg.leven
	avlogEC ₅₀	Het gemiddelde van de beschikbare EC ₅₀ -data (concentraties waarbij 50% van het bestudeerde effect zichtbaar is) voor aquatische soorten in log(mg.L ⁻¹).

RWZI-module

De nieuwste versie van USEtox (versie 3.0) bevat een RWZI-module, waarbij de waterzuiveringsinstallatie als opzichzelfstaand compartiment en als emissiebron wordt beschouwd. In USEtox wordt het effect van de RWZI bepaald door de transferfracties van de stof naar lucht en water, berekend door gebruik te maken van modellen uit EPI Suite™. Dit betekent dat door het berekenen van transportfracties emissies van stoffen van/naar lucht en (oppervlakte)water kunnen worden gesimuleerd, zowel in landelijk als in stedelijk gebied. Deze stofafhankelijke transportfactoren naar lucht, water en sediment in de RWZI zijn gebaseerd op waarden die worden verkregen uit EPI Suite™ en het SimpleTreat-model (Struijs, 2014).

Effect

Toxische relevantie met betrekking tot de humane gezondheid kan worden berekend via:

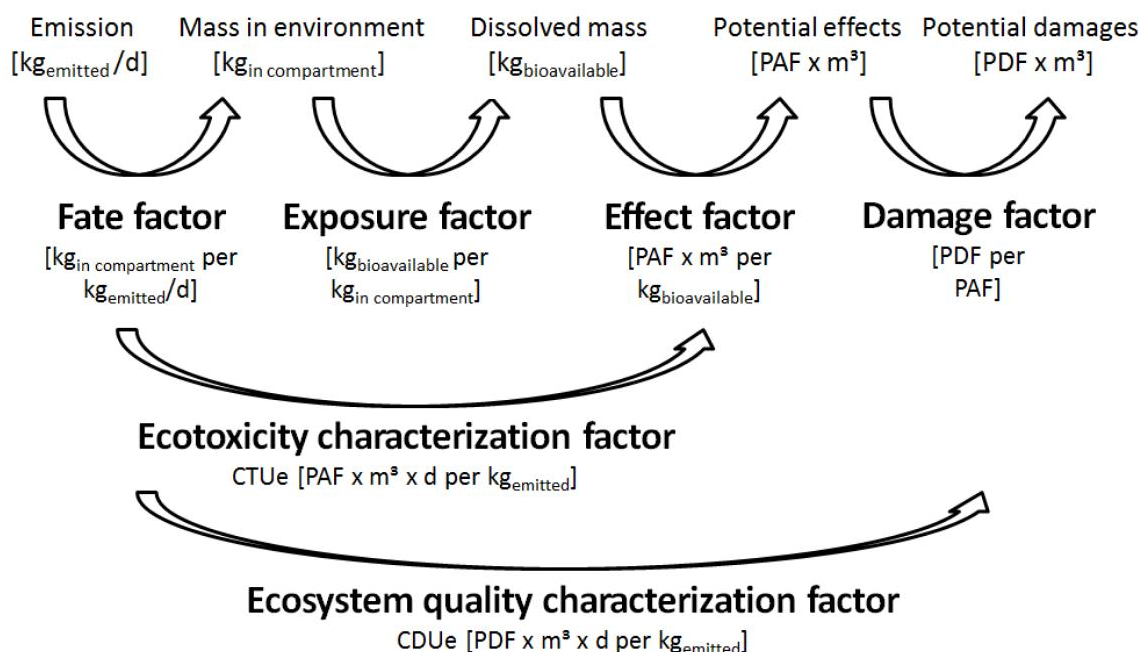
$$HTP_{mid} = EF_{hum} \cdot IF_{agg} \quad [2]$$

$$HTP_{eind} = DF_{cancer/non-cancer} * HTP_{mid} \quad [3]$$

waarbij HTP_{mid} en HTP_{eind} respectievelijk staan voor de humaan-toxische potentie als midpunt (uitgedrukt in ziektegevallen per kg geëmitteerde stof) en eindpunt (uitgedrukt in *disability-adjusted life years* (DALY; het aantal jaar dat verloren gaat ten gevolge van ziekte, handicap of vroege dood) per kilogram geëmitteerde stof). HTP_{mid} wordt in USEtox berekend door een matrix aan effectfactoren voor blootstelling via inhalatie, ingestie en huidabsorptie (EF_{hum}) te vermenigvuldigen met een matrix aan innamefactoren (IF_{agg}). HTP_{eind} wordt in USEtox vervolgens berekend door HTP_{mid} te vermenigvuldigen met een schadefactor ($DF_{cancer/non-cancer}$); 2,7 DALY per ziektegeval voor non-carcinogene effecten (geen kanker) en 11,5 DALY per ziektegeval voor carcinogene effecten (kanker).

Effectfactoren voor (non-)carcinogene effecten via de drie blootstellingsroutes worden gebaseerd op zogenaamde ED_{50} s: effectdoses waarop 50% effect waargenomen kan worden. Deze waarden zijn essentieel in het berekenen van de mid- en eindpunten (en dus karakterisatiefactoren) voor humane toxiciteit in LCA. Als standaard wordt hierbij aangenomen dat de kans op het ontwikkelen van kanker of een niet-kankergerelateerde ziekte met 50% toeneemt bij inname (inhalatie + ingestie) van een concentratie gelijk aan de ED_{50} gedurende een heel leven (70 jaar). ED_{50} s voor mensen zijn echter niet beschikbaar. Om deze reden wordt in USEtox (en andere LCA-tools) gebruikgemaakt van ED_{50} s op basis van subchronische toxiciteit uit studies met ratten (uitgedrukt in kg/lichaamsgewicht). Om deze te vertalen naar humaanrelevante ED_{50} s wordt gebruikgemaakt van een intersoort-extrapolatiefactor en een extrapolatiefactor om subchronische effecten te vertalen naar chronische effecten. Tevens wordt aangenomen dat de gemiddelde mens 70 kilogram weegt en een gemiddelde gezonde levensverwachting van 70 jaar heeft (Huijbregts et al., 2005). Het is in USEtox mogelijk om nieuwe data voor ED_{50} s toe te voegen, rekening houdend met de rekenregels zoals beschreven in de handleiding van USEtox (Fantke et al., 2017).

2.1.2 Ecotoxiciteit (zoetwater)



Figuur 2: Visuele weergave van het emissie-naar-schade-raamwerk voor de ecotoxicologische impact van stoffen, zoals gebruikt in USEtox (Fantke et al., 2017).

Inname

Inname van de stof door een organisme in een ecosysteem wordt berekend in USEtox door rekening te houden met drie blootstellingsroutes: directe inname van een stof via opgelost koolstof in het water waarin het organisme leeft, inname van zwevende deeltjes en ingestie van andere organismen.

De inname van een stof via opgelost organisch materiaal is stofafhankelijk. Voor stoffen waarvoor geen data met betrekking tot organisch koolstof-water partiticoëfficiënten beschikbaar zijn, kan gebruikgemaakt worden van het model van Burkhard (2000), waarbij deze partiticoëfficiënten worden afgeleid op basis van de Log Kow (octanol-waterpartiticoëfficiënt). De inname van zwevende deeltjes is gelinkt aan een massabalans voor organisch koolstof in zoetwater, gebaseerd op diverse partiticoëfficiënten. Hoewel concentraties van een stof in een organisme door inname via de eerste twee blootstellingsroutes niet boven de concentratie van de stof buiten het organisme uit zullen komen, is dit niet het geval wanneer de derde blootstellingsroute in acht wordt genomen. Door bioaccumulatie van de stof in soorten die hoger in de voedselketen voorkomen (denk bijvoorbeeld aan roofvissen), zijn concentraties in organismen regelmatig hoger dan concentraties in hun omgeving, zeker voor lipofiele (vetminnende) stoffen. Bioaccumulatie en uiteindelijke inname van een stof via deze derde blootstellingsroute wordt in USEtox gemodelleerd door gebruik te maken van stofspecifieke bioaccumulatiefactoren (BAFs), gemeten in experimentele studies of geschat door EPI Suite™, berekend via het model van Arnot en Gobas (2003). Zie voor de uitgebreide berekeningen de USEtox-documentatie van Fantke et al. (2017).

Effect

Toxische relevantie met betrekking tot de impact op het milieu kan worden berekend via:

$$ETP_{mid} = EF_{eco} \cdot (XF_{eco} \cdot FF_{eco}) \quad [4]$$

$$ETP_{eind} = DF * ETP_{mid} \quad [5]$$

waarbij ETP_{mid} en ETP_{eind} respectievelijk staan voor de ecotoxische potentie als midpunt (uitgedrukt in potentieel aangetaste fractie soorten per kg geëmitteerde stof) en eindpunt (uitgedrukt in potentieel verdwijnende fractie soorten per kg geëmitteerde stof). ETP_{mid} wordt in USEtox berekend door een matrix aan effectfactoren voor blootstelling via opgeloste organisch koolstof, zwevend organisch materiaal en voedsel (EF_{eco}) te vermenigvuldigen met een matrix aan innamefactoren (gebaseerd op blootstellingsfactoren (XF_{eco}) en fatefactoren (FF_{eco})). ETP_{eind} wordt in USEtox vervolgens berekend door ETP_{mid} te vermenigvuldigen met een factor 0,5 om de potentieel aangetaste fractie soorten (PAF) om te rekenen naar de potentieel verdwijnende fractie soorten (PDF).

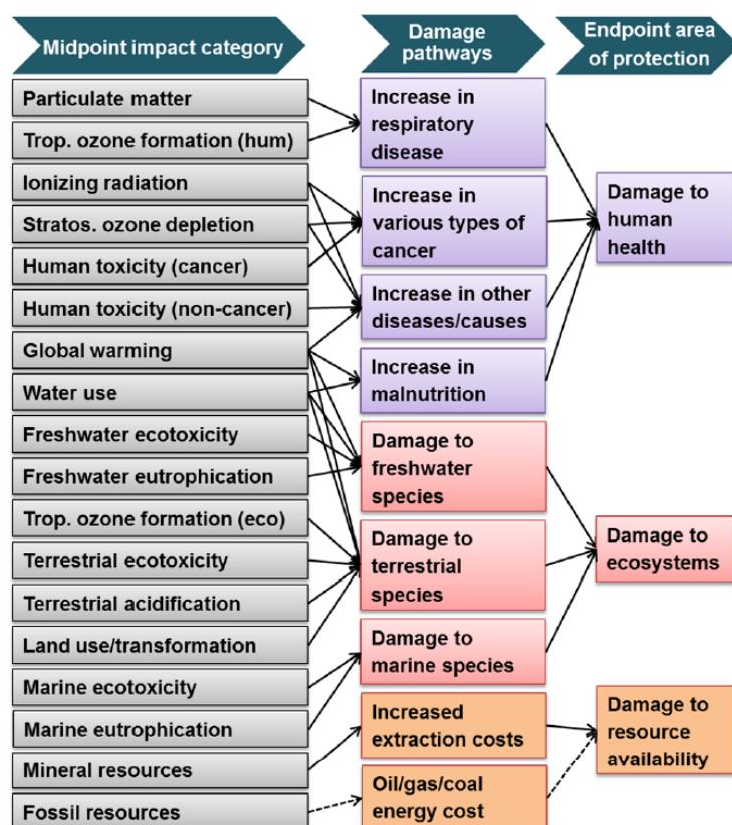
Effectfactoren voor ecotoxiciteit via de drie blootstellingsroutes worden, net als voor humane toxicologie, gebaseerd op EC_{50} s, effectconcentraties van de stof in water waarop 50% effect waargenomen kan worden. Deze waarden zijn nodig om mid- en eindpunten (en dus karakterisatiefactoren) te kunnen berekenen voor ecotoxiciteit in LCA. Het is in USEtox mogelijk om nieuwe data voor EC_{50} s toe te voegen, rekening houdend met de rekenregels zoals beschreven in de handleiding van USEtox (Fantke et al., 2017).

2.2 Effectbeoordelingsmodel: ReCiPe 2016-methode

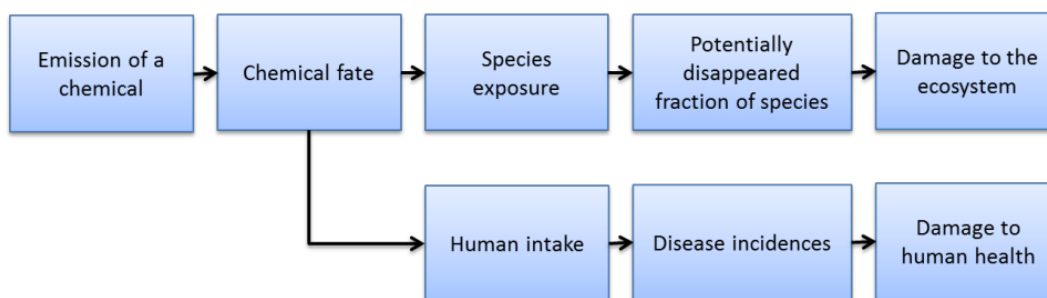
Milieu-impact wordt in ReCiPe, net als in USEtox, op twee niveaus berekend: 1. op midpuntniveau als de beoordeling voor milieuthema's zoals klimaatverandering of verzuring en 2. op eindpuntniveau als de beoordeling voor de effecten van milieuvervuiling zoals menselijke gezondheid en ecosysteemdiensten (Figuur 3).

2.2.1 Humane toxiciteit (carcinogene en non-carcinogene toxiciteit)

Via ReCiPe 2016 kunnen milieueffecten voor zeventien verschillende impactcategorieën berekend worden (zie Figuur 3). Om de potentiële (eco)toxische effecten voor mens en milieu in te schatten wordt, net als in USEtox, gebruikgemaakt van een oorzaak-gevolgketen (zie Figuur 4). ReCiPe-midpunten zijn gebaseerd op 1,4'-dichlorobenzeen-equivalenten en geven dus aan hoe toxisch een stof is ten opzichte van 1,4'-dichlorobenzeen (1,4-DCB). Deze stof wordt vaak als referentiestof gebruikt in LC(I)A-modellen, vanwege de hoge toxiciteit van de stof (Motejlová & Koci, 2011). De uiteindelijke huumaantoxische potentie van stof x (HTP_x ; in gevallen per kg geëmitteerde stof) wordt bepaald door de innamefractie (IF; de *fatefactor* (FF) vermenigvuldigd met een blootstellingsfactor (XF)) te vermenigvuldigen met een effect factor (EF) voor alle blootstellingsroutes (vergelijking 6) en deze te delen door diezelfde waarde voor de referentiestof 1,4'-dichlorobenzeen (Huijbregts, 1999).



Figuur 3: Representatie van de relaties tussen de midpunten en eindpunten, via de damage pathways, zoals in ReCiPe 2016 worden gehanteerd (Huijbregts et al., 2016).



Figuur 4: Oorzaak-gevolgketen, van emissies naar schade aan de menselijke gezondheid en ecosystemen (Huijbregts et al., 2016).

Inname

Inname van een stof door een mens wordt in ReCiPe op twee manieren gemodelleerd, via twee verschillende blootstellingsroutes (in plaats van drie zoals in USEtox); inhalatie (waarbij géén onderscheid wordt gemaakt tussen stedelijke gebieden en landelijke gebieden) en ingestie van drinkwater en voedsel. Inname via inhalatie en ingestie is afhankelijk van het transport van de stof tussen de milieucompartimenten en de mens. Zowel de *fate*factoren als de blootstellingsfactoren worden in ReCiPe 2016 berekend via het USES-LCA 2.0 multimedia- en effectmodel. De berekende inname van een stof via voedsel wordt gebaseerd op onder andere een bioaccumulatiefactor (BAF; in hoeverre wordt een stof vastgelegd in vlees, zuivel of groente). Deze waarden worden uit de USEtox-database gehaald en zijn dus grotendeels hetzelfde als de waarden die in USEtox worden gebruikt. Wanneer deze waarden niet beschikbaar zijn, wordt in USES-LCA 2.0 echter gebruikgemaakt van regressies zoals beschreven in Hendriks et al. (2007), terwijl deze waarden in USEtox uit EPI Suite™ worden berekend via het model van Arnot en Gobas (2003).

Effect

Toxische relevantie met betrekking tot de humane gezondheid kan worden berekend via:

$$HTP_{mid} = \sum_r \sum_g \frac{IF_{x,i,r,g,c} \cdot EF_{x,r,c/nc,c}}{IF_{DCB,ua,r,g,c} \cdot EF_{DCB,r,c/nc,c}} \quad [6]$$

$$HTP_{eind} = f_h * HTP_{mid} \quad [7]$$

waarbij HTP_{mid} en HTP_{eind} respectievelijk staan voor de humaantoxische potentie als midpunt (uitgedrukt in kg 1,4 DCB-equivalenten naar stedelijke lucht) en eindpunt (uitgedrukt in *disability-adjusted life years* (DALY; het aantal jaar dat verloren gaat ten gevolge van ziekte, handicap of vroege dood) per kilogram 1,4-DCB equivalenten naar stedelijke lucht). HTP_{mid} wordt in ReCiPe 2016 berekend door een matrix aan effectfactoren voor blootstelling (r) via inhalatie of ingestie (geen huidabsorptie, zoals in USEtox) ($EF_{x,r}$) te vermenigvuldigen met een matrix aan innamefactoren ($IF_{x,i,r,g,c}$), en deze te relateren aan diezelfde waarde voor 1,4'-dichloorbenzeen. Hierbij wordt onderscheid gemaakt tussen verschillende geografische schalen (g), culturele perspectieven (c , zie [Culturele perspectieven](#)) en kanker-gerelateerde en niet-kanker-gerelateerde ziekten (c/nc). HTP_{eind} wordt in ReCiPe 2016 vervolgens berekend door HTP_{mid} te vermenigvuldigen met een Midpunt-naar-eindpunt-conversiefactor (f_h) per cultureel perspectief. Deze factoren representeren de eindpuntwaarden voor 1,4'-dichloorbenzeen ($IF_{DCB} * EF_{DCB} * DF_{DCB}$), waarbij de schadefactor, net als in USEtox 2,7 DALY per ziektegeval voor non-carcinogene effecten (geen kanker) en 11,5 DALY per ziektegeval voor carcinogene effecten (kanker) bedraagt. Deze waarden zijn gebaseerd op gemiddelde factoren voor 49 veelvoorkomende ziekten uit 1990 (Huijbregts et al., 2005). De onzekerheid in deze conversiefactoren is berekend, gebaseerd op het 2.5^e en 97.5^e percentiel van deze factoren. Voor carcinogene effecten bedraagt de onzekerheidsfactor 2,8 en voor non-carcinogene factoren bedraagt deze 13 (Huijbregts et al., 2005).

2.2.2 Ecotoxiciteit (zoetwater)

Inname

In ReCiPe 2016 wordt inname van de stof door een organisme in een ecosysteem enkel gebaseerd op *fate*factoren en wordt specifieke blootstelling aan het organisme buiten beschouwing gelaten. Net als bij het berekenen van karakterisatiefactoren voor humane toxiciteit worden de *fate*factoren in ReCiPe 2016 berekend via het USES-LCA 2.0 multimedia- en effectmodel.

Effect

Toxische relevantie met betrekking tot het milieu (zoetwater) wordt berekend in ReCiPe via:

$$ETP_{mid} = \sum_g \frac{FF_{x,i,j,g,c} \cdot EF_{x,j,c}}{FF_{DCB,ref,j,g,c} \cdot EF_{DCB,j,c}} \quad [8]$$

$$ETP_{eind} = f_{e,c} * ETP_{mid} \quad [9]$$

waarbij ETP_{mid} en ETP_{eind} respectievelijk staan voor de ecotoxische potentie als midpunt (uitgedrukt in kg 1,4 DCB-equivalenten naar zoetwater) en eindpunt (uitgedrukt in verloren soorten per kilogram 1,4-DCB equivalenten per jaar). ETP_{mid} wordt in ReCiPe 2016 berekend door een matrix aan effectfactoren (EF; potentieel verloren fractie soorten m^3/kg) te vermenigvuldigen met een matrix aan *fate*factoren (FF). Het betreft hier dus geen innamefactoren zoals bij USEtox, aangezien directe blootstelling via water wordt verondersteld. De uitkomst van deze matrixvermenigvuldiging wordt gerelateerd aan eenzelfde waarde voor 1,4'-dichloorbenzeen. Hierbij wordt onderscheid gemaakt tussen verschillende geografische schalen (g), en culturele perspectieven (c, zie hieronder). ETP_{eind} wordt in ReCiPe 2016 vervolgens berekend door ETP_{mid} te vermenigvuldigen met een midpunt-naar-eindpunt conversiefactor (f_e) per cultureel perspectief (c). Deze conversiefactoren representeren de eindpuntwaarden voor 1,4'-dichloorbenzeen ($FF_{DCB} * EF_{DCB} * SD$), waarbij de SD staat voor de soortendichtheid in zoetwater ($7,89 \cdot 10^{-10}$ soorten per m^3). Dit laatste zegt dus iets over biodiversiteit in plaats van het aantal individuen van een soort in het water.

Culturele perspectieven

Mid- en eindpunten voor zowel humane toxiciteit als ecotoxiciteit worden berekend voor drie culturele scenario's: individualistisch, hiërarchisch en egalitair. Deze perspectieven zijn gebaseerd op de "cultural theory" van Thompson et al. (1990) waarin vergelijkbare typen gedragingen, aannames en keuzes van de mens worden geclusterd in drie groepen:

- I - Individualistisch: gebaseerd op een interesse op korte termijn, waarbij technologisch optimisme heerst (de mens is welwillend om zich aan te passen) en de impacttypen onbetwist zijn, wat betekent dat ze er algehele consensus heerst. Dit cultureel perspectief heeft de kortste tijdsspanne.
- H - Hiërarchisch: Dit is het meest voorkomende scenario. Er heerst wetenschappelijke consensus en de tijdsspanne bedraagt ongeveer 100 jaar.
- E - Egalitair: Dit is het meest voorzichtige scenario met de laagste consensus, met de langste adaptatietijd (1000 jaar tot oneindig).

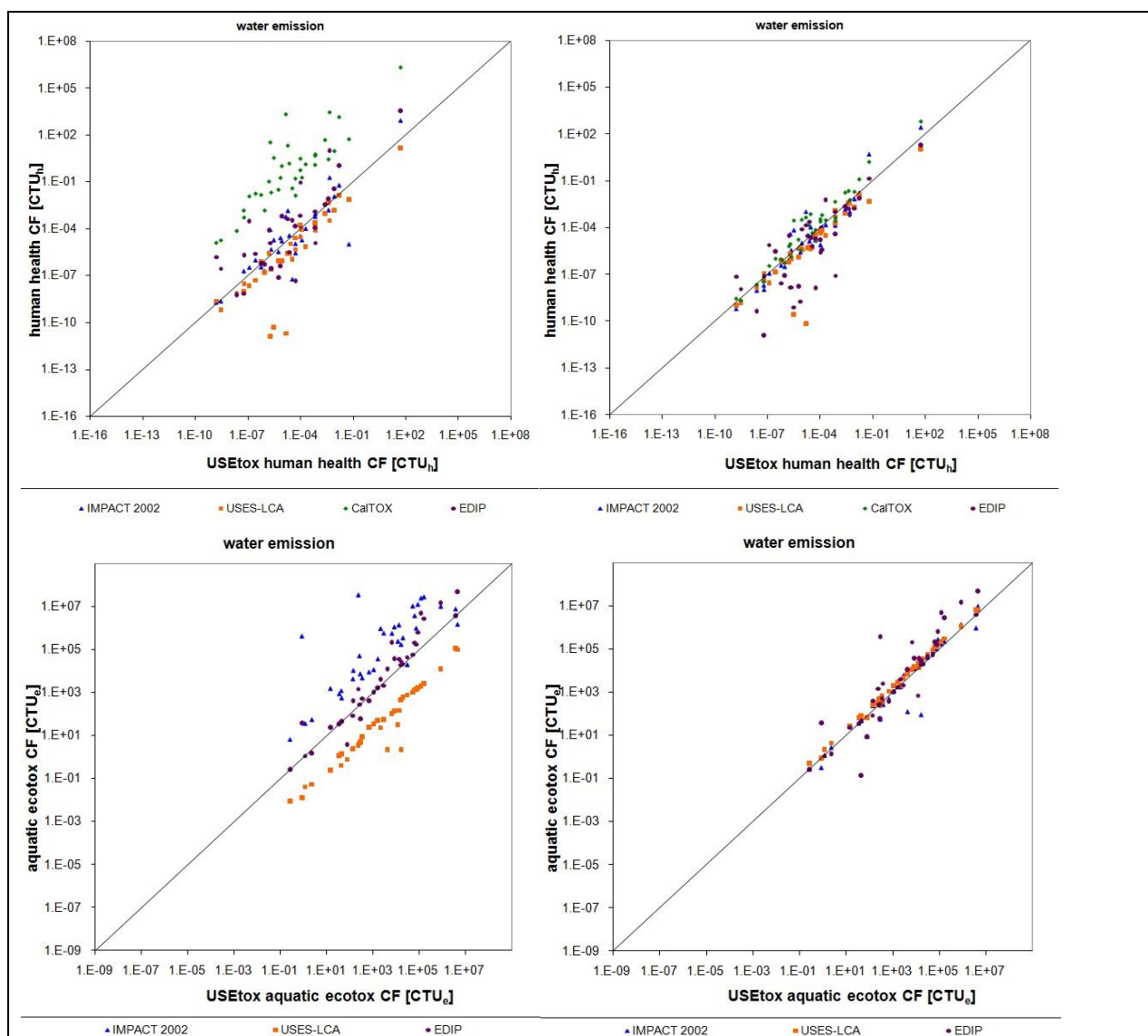
De belangrijkste verschillen en overeenkomsten tussen deze culturele perspectieven m.b.t. humane toxiciteit en ecotoxiciteit zijn in de onderstaande tabel weergegeven (Tabel 2).

Tabel 2: Overeenkomsten en verschillen tussen de verschillende culturele perspectieven.

		Individualist	Hierarchist	Egalitarian
	Tijdshorizon	20 jaar	100 jaar	Oneindig
Humane toxiciteit	Blootstellingsroutes voor humane toxiciteit	Organische stoffen: alle blootstellingsroutes worden meegenomen in de modelberekeningen Metalen: alleen drinkwater en lucht worden meegenomen.	Alle blootstellingsroutes	Alle blootstellingsroutes
	Carcinogeniteit	Alleen stoffen met 1, 2Am 2B- classificatie IARC (International Agency for Research on Cancer)	Alle stoffen met carcinogene effecten	Alle stoffen met carcinogene effecten
Ecotoxiciteit	Milieucompartimenten voor mariene ecotoxiciteit	Zee + oceaan voor organics en niet-essentiële metalen. Voor essentiële metalen alleen zeecompartiment.	Zee en oceaan voor alle stoffen	Zee en oceaan voor alle stoffen
	Minimale aantal soorten getest voor ecotoxiciteit	4	1	1

2.3 Verschillen en overeenkomsten USEtox en ReCiPe2016

Omdat ReCiPe 2016 gebruikmaakt van het multimedia-model van USES-LCA worden er (grote) verschillen verwacht tussen dit model en USEtox in de berekende karakterisatiefactoren voor humane toxicologie (carcinogeen/non-carcinogeen) en (zoetwater)ecotoxiciteit. USEtox is in 2005 ontwikkeld als consensusmodel waarin – tot toen – veel gebruikte methoden (waaronder USES-LCA) zijn geharmoniseerd (Rosenbaum et al., 2008). Karakterisatiefactoren voor humane toxiciteit en ecotoxiciteit, berekend door meerdere modellen, zijn al eerder met elkaar vergeleken in het OMNIITOX-project (Zie Figuur 5). In onderstaande figuur zijn resultaten (karakterisatiefactoren) voor USEtox uitgezet tegenover karakterisatiefactoren berekend via het USES-LCA-model (gebruikt in ReCiPe 2016). Hieruit blijkt dat vooral voor ecotoxiciteit een onderschatting (of in USEtox een overschatting) van karakterisatiefactoren berekend door ReCiPe (USES-LCA) wordt gezien ten opzichte van factoren berekend door USEtox.



Figuur 5: Vergelijking van karakterisatiefactoren voor organische stoffen berekend door USEtox en door andere modellen voor (links) en na (rechts) harmonisatie van het model voor humane toxiciteit (boven) en ecotoxiciteit (beneden), ten gevolge van emissie naar water. Overgenomen uit (Rosenbaum et al., 2008).

In tabel 3 worden alle gevonden verschillen en overeenkomsten tussen methodologieën van beide modellen getoond.

Tabel 3: verschillen en overeenkomsten tussen de methodologieën in LCA-modellen USEtox en ReCiPe.

	USEtox 3.0	ReCiPe 2016
Oorzaak-gevolgketen	Beide methoden berekenen mid- en eindpunten aan de hand van: $CF = FF * XF * EF * DF \mid CF = IF * EF$ waarbij EF in ReCiPe EF (zoals gebruikt in USEtox) en DF combineert.	
Culturele perspectieven	Maakt geen gebruik van diverse culturele perspectieven.	Maakt gebruik van drie verschillende culturele perspectieven (individualist, hierarchist en egalitarian).
<i>Fate</i>	Berekend op basis van een "eigen" matrix (multimediamodel). USEtox is ontwikkeld om intrinsieke verschillen tussen eerdere methoden (waaronder USES-LCA) te overbruggen, waar eerder grote verschillen tussen voorspelde karakterisatiefactoren werden waargenomen (meerdere orde-groottes) (Sala et al., 2022), n.a.v. input via workshops.	Berekend op basis van het USES-LCA 2.0 model (van Zelm et al., 2009).
Blootstelling (mens)	Drie blootstellingsroutes; inhalatie, ingestie (drinkwater, vlees-, melk en gewasconsumptie) en via de huid	Twee blootstellingsroutes; Inhalatie en ingestie (drinkwater en vlees- en melkconsumptie).
	Missende bioaccumulatiefactoren worden berekend via het model van Arnot & Gobas (2003).	Missende bioaccumulatiefactoren worden berekend via het model van Hendriks et al. (2007).
Blootstelling (aquatische organismen)	Inname van de stof via drie blootstellingsroutes (iF = XF * FF)	100% blootstelling aan de stof aangenomen (iF = FF).
Toxiciteit (humane toxiciteit)	Midpunt-karakterisatiefactoren worden uitgedrukt in cases/kg geëmitteerde stof (humane toxicologie) en PAF * m ³ /kg geëmitteerde stof (ecotoxicologie).	Midpunt-karakterisatiefactoren worden uitgedrukt in kg 1,4 dichlorobenzeen-equivalenten geëmitteerde stof naar lucht (humane toxicologie) en PDF*m ³ *jaar kg 1,4 dichlorobenzeen-equivalenten geëmitteerde stof naar zoet water/ zee en bodem (ecotoxicologie)
	Eindpunt-karakterisatiefactoren worden uitgedrukt in DALY/kg geëmitteerde stof (humane toxicologie) en PDF * m ³ * d/ kg geëmitteerde stof (ecotoxicologie).	Eindpuntkarakterisatiefactoren worden uitgedrukt in DALY/kg geëmitteerde stof (humane toxicologie) en aantal soorten * m ³

		* jaar/ kg geëmitteerde stof (ecotoxicologie).
Toxiciteit (ecotoxiciteit)	Beide methoden hanteren een schadefactor van 11,5 DALY voor carcinogene stoffen en een DALY van 2,7 DALYs voor non-carcinogene stoffen. In ReCiPe is het echter gebaseerd op 1,4-DCB-equivalenten. Beiden zijn gebaseerd op een lineaire dosis-responsrelatie door Huijbregts et al. 2005 (Huijbregts et al., 2005).	
Fysisch-chemische data	Enkel zoetwaterecotoxiciteit (hoewel het USEtox-team graag mariene en terrestrische ecotoxiciteit wil meenemen in de toekomst (Fantke et al., 2018))	Naast zoetwaterecotoxiciteit ook mariene ecotoxiciteit en terrestrische ecotoxiciteit.
	Ingebouwde RWZI-module	
	Substance data is gebaseerd op USEtox-databases voor organische en anorganische stoffen.	
	Erg transparant, maar daardoor ook gecompliceerd.	

2.4 Omrekenen van effecten naar CO₂-impact

Veel bedrijven en instanties werken met de CO₂-voetafdruk als maat voor milieubelasting, zo ook in de watersector. Drinkwaterbedrijven werken aan klimaatneutraliteit door de emissies in CO₂-voetafdruk te bepalen. Wanneer we de (verbetering van) waterkwaliteit mee zouden willen nemen, kán het handig zijn om aan te sluiten in dezelfde systematiek. Hoewel dit niet helemaal overeenkomstig is met de werkelijkheid, omdat bij de emissie van een stof naar water geen CO₂ vrijkomt, kan dit wel helpen om de ernst van de emissie van een stof via de RWZI in de context te plaatsen van andere milieu-impacts, zoals energie- en chemicaliëngebruik. Zo kan waterkwaliteitsverbetering door gebruik van nieuwe technieken in de riool- of drinkwaterzuivering afgewogen worden tegen de toename in energieverbruik en CO₂-emissie door deze technieken. Ook is het mogelijk om op deze manier direct de omgerekende CO₂-impact van concentraties van stoffen in het effluent mee te nemen en zo de totale impact van de riool- of drinkwaterzuivering als geheel op het milieu in te schatten.

De CO₂-impact van milieueffecten gerelateerd aan waterkwaliteit kunnen worden berekend door de karakterisatiefactoren voor humane toxiciteit en ecotoxiciteit voor de stof te vermenigvuldigen met diezelfde karakterisatiefactoren voor CO₂ (Zie Tabel 4). Aangezien er geen karakterisatiefactoren voor CO₂ in USEtox beschikbaar zijn, kunnen alleen de waarden uit ReCiPe worden meegenomen.

Tabel 4: Karakterisatiefactoren voor (eco)toxiciteit voor CO₂ die dienen als omrekenfactoren om effecten in CO₂-equivalenten uit te kunnen drukken.

		ReCiPe 2016	USEtox 3.0
Ecotoxiciteit	species.year/kg CO ₂	2,80E-09	x
Humane toxiciteit	DALY/kg CO ₂	9,28E-07	x

Karakterisatiefactoren geconverteerd naar CO₂-equivalenten kunnen vervolgens gebruikt worden om de relatieve toename in milieu-impact van emissie van een stof, of de relatieve afname van milieu-impact na verwijdering van de stof, te kunnen bepalen (uitgedrukt in een percentage).

3 Vergelijking van karakterisatiefactoren voor drie stofgroepen berekend met ReCiPe en USEtox.

Onderstaande paragrafen beschrijven een vergelijking van karakterisatiefactoren berekend via de USEtox- en ReCiPe-methodes voor bestrijdingsmiddelen, geneesmiddelen en zware metalen.

ReCiPe-midpunts zijn gebaseerd op 1,4-dichlorobenzeen-equivalenten en geven dus aan hoe toxisch een stof is ten opzichte van 1,4-dichlorobenzeen. Bij het omrekenen naar eindpunten wordt gebruik gemaakt van conversiefactoren, die vergelijkbaar zijn (maximale afwijking een factor 1.25) met de eindpunten voor humane toxiciteit en ecotoxiciteit, zoals gerapporteerd door USEtox 3.0.

3.1 Methode voor de vergelijking van resultaten uit ReCiPe en USEtox

3.1.1 Carcinogene toxiciteit

USEtox rapporteert het midpunt voor carcinogene toxiciteit in aantal ziektegevallen per kilogram geëmitteerde stof, terwijl ReCiPe het midpunt voor carcinogene toxiciteit rapporteert in kilogram geëmitteerde stof in 1,4'-DCB-equivalenten. USEtox rekent deze midpunten om naar eindpunten door deze te vermenigvuldigen met een schadefactor (damage factor) van 11,5, waarna deze eindpunten worden uitgedrukt in *disability-adjusted life years* (DALY; het aantal jaar dat verloren gaat ten gevolge van ziekte, handicap of vroege dood) per kilogram geëmitteerde stof (Huijbregts et al., 2005). ReCiPe rekent midpunten om in kilogram geëmitteerde 1,4'-DCB-equivalenten naar eindpunten in DALY per kilogram geëmitteerde stof naar lucht op basis van een conversiefactor. Hierbij wordt bij alle culturele perspectieven (Zie tabel 2) uitgegaan van $3,32 \cdot 10^{-6}$ DALY per kilogram 1,4'-DCB-equivalent. Het eindpunt voor humane toxiciteit gerapporteerd voor 1,4'-DCB in USEtox is $2,64 \cdot 10^{-6}$ DALY per kilogram.

3.1.2 Non-carcinogene toxiciteit

USEtox rapporteert het midpunt voor non-carcinogene toxiciteit in aantal ziektegevallen per kilogram geëmitteerde stof, terwijl ReCiPe het midpunt voor non-carcinogene toxiciteit rapporteert in kilogram geëmitteerde stof in 1,4 DCB-equivalenten (Huijbregts et al., 2016). USEtox converteert deze midpunten naar eindpunten door deze te vermenigvuldigen met een schadefactor (damage factor) van 2,7, waarna deze eindpunten worden uitgedrukt in *disability-adjusted life years* (DALY; het aantal jaar dat verloren gaat ten gevolge van ziekte, handicap of vroege dood) per kilogram geëmitteerde stof (Huijbregts et al., 2005). ReCiPe converteert midpunten in kilogram geëmitteerde 1,4 DCB-equivalenten naar eindpunten in DALY per kilogram geëmitteerde stof per op basis van een conversiefactor. Hierbij wordt bij alle perspectieven (zie Tabel 2) uitgegaan van $2,28 \cdot 10^{-7}$ DALY per kilogram 1,4 DCB-equivalent, vergelijkbaar met het eindpunt voor non-carcinogene toxiciteit voor 1,4-DCB gerapporteerd in USEtox ($2,15 \cdot 10^{-7}$ DALY per kilogram).

3.1.3 Zoetwaterecotoxiciteit

ReCiPe rekent midpunten om in kilogram geëmitteerde 1,4'-DCB-equivalenten naar eindpunten in soortenverlies (PDF) per kilogram 1,4'-DCB-equivalenten naar lucht. Hierbij wordt bij alle culturele perspectieven (Zie tabel 2) uitgegaan van $6,95 \cdot 10^{-10}$ PDF per kilogram 1,4'-DCB-equivalenten. In USEtox wordt geen ecotoxiciteit-eindpunt voor 1,4'-DCB-equivalenten gerapporteerd.

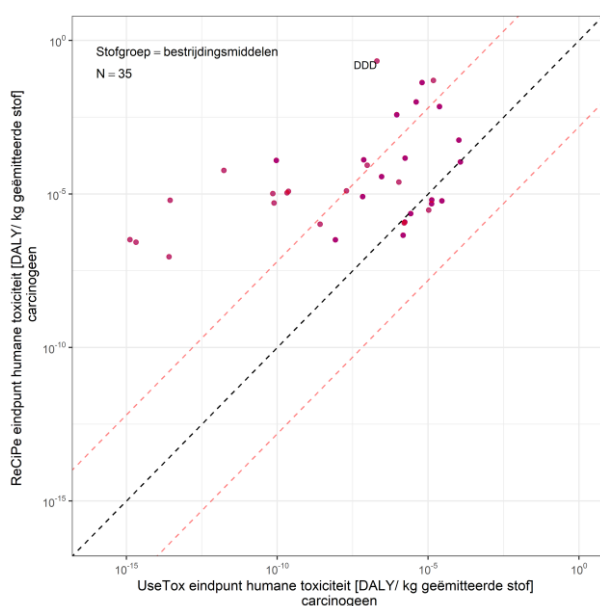
In USEtox wordt een conversiefactor van 0,5 gebruikt om de potentieel aangetaste soortenfractie (PAF) per m³ per dag per kg geëmitteerde stof om te zetten in potentieel verdwenen soortenfractie (PDF) per m³ per dag per kg geëmitteerde stof, ongeacht de stof (Fantke et al., 2018; Fantke et al., 2017). Dit is gebaseerd op de aanname dat 50% van de aangetaste soorten uiteindelijk uit een ecosysteem zal verdwijnen, die van origine eerder werd gebruikt in de IMPACT 2002+-methode (Hauschild & Huijbregts, 2015; Rosenbaum, 2015). Aangezien een schadefactor van 50% altijd resulteert in het uitsterven van de soort na 100 jaar blootstelling, wordt in ReCiPe uitgegaan van het principe dat de PDF mee-schaalt met de PAF van een bepaalde stof (met een bepaald toxisch werkingsmechanisme) met een factor van 1 (PDF=PAF) (Larsen & Hauschild, 2007). Daarnaast wordt in de conversiefactor rekening gehouden met een initiële soortendichtheid in zoetwater van $7,89 \cdot 10^{-10}$ soort/m³ (Huijbregts et al., 2016). Vanwege deze discrepanties in conversie van mid- naar eindpunten worden de eindpunten van USEtox vermenigvuldigd met de soortendichtheid van $7,89 \cdot 10^{-10}$ soort/m³ alvorens deze vergeleken worden met de eindpunten uit ReCiPe 2016 in Figuur 7. Hierbij worden de USEtox-midpunten omgezet naar soortenverlies per jaar/ m³/ kg 1,4-DCB-equivalenten. Mede om deze reden is een sterke behoefte aan harmonisatie van karakterisatiefactoren voor ecotoxiciteit ontstaan (Fantke et al., 2018; Huijbregts et al., 2016; Rosenbaum et al., 2018)

3.2 Bestrijdingsmiddelen

Om USEtox en ReCiPe-resultaten met elkaar te kunnen vergelijken is voor bestrijdingsmiddelen gebruikgemaakt van een lijst gerapporteerd in een WHO-rapport uit 2019 (WHO, 2020). Van deze 945 bestrijdingsmiddelen zijn er voor 308 voor USEtox en 417 in ReCiPe 2016 data beschikbaar om te analyseren. In totaal konden 35 carcinogene eindpunten (Figuur 6), 133 non-carcinogene eindpunten (Figuur 7), en 281 ecotoxiciteitseindpunten (zoetwater; Figuur 8) voor bestrijdingsmiddelen worden vergeleken.

3.2.1 Carcinogene toxiciteit

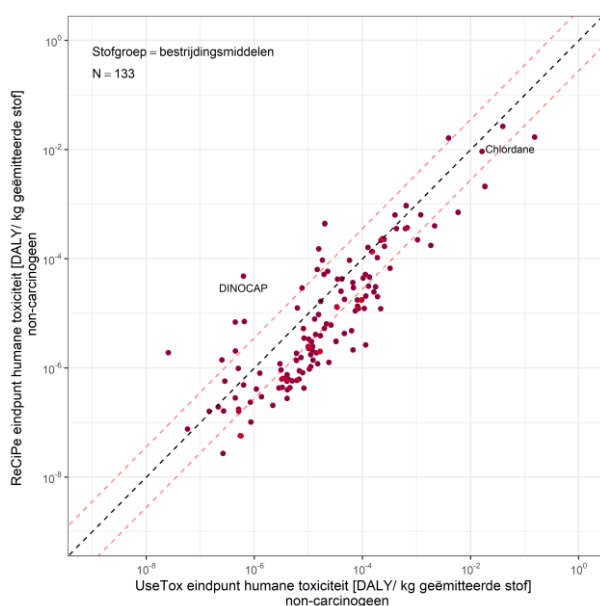
In totaal kunnen voor 35 bestrijdingsmiddelen karakterisatiefactoren m.b.t. carcinogeniteit via USEtox worden vergeleken met dezelfde eindpunten via ReCiPe. De hoogste karakterisatiefactor (en dus de grootste kankerverwekkende potentie), wordt door ReCiPe berekend voor dichlorodiphenyldichloroethane (DDD, 0,21), een metaboliet van DDT (Figuur 7 en Figuur S1 in de bijlage). Ongeveer 50% van alle ReCiPe-resultaten bevinden zich binnen een factor 1,75 van de USEtox-resultaten (zie de rode lijnen in Figuur 7). De stof met de grootste afwijking tussen beide methoden is pentachloorfenol, een organisch pesticide. Over het algemeen vallen karakterisatiefactoren berekend door USEtox lager uit dan de factoren berekend via ReCiPe; slechts 20% van de USEtox-eindpunten is hoger dan de ReCiPe-eindpunten, vergelijkbaar met het eindpunt voor non-carcinogene toxiciteit voor 1,4-DCB gerapporteerd in USEtox.



Figuur 6: USEtox-eindpunten (in DALY per kg geëmitteerde stof) uitgezet tegen ReCiPe-eindpunten, gerelateerd aan carcinogeniteit van bestrijdingsmiddelen. De zwarte lijn geeft de 1:1 lijn weer. De rode lijnen geven het gebied weer waarin 50% van de data zich bevindt.

3.2.2 Non-carcinogene toxiciteit

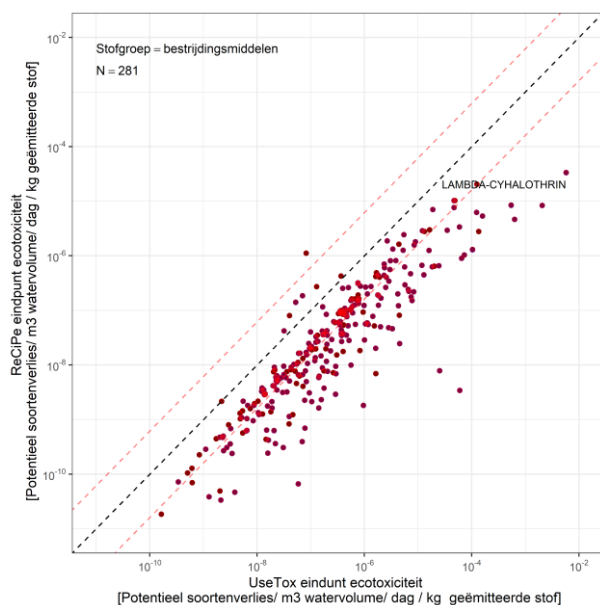
In totaal kunnen voor 133 bestrijdingsmiddelen karakterisatiefactoren m.b.t. non-carcinogeniteit via USEtox worden vergeleken met dezelfde eindpunten via ReCiPe. De hoogste karakterisatiefactor (en dus de grootste impact op de mens), wordt door ReCiPe berekend voor chlordaan (0,15; Figuur 7 en Figuur S2 in de Bijlage), een organisch pesticide. Ongeveer 50% van alle ReCiPe-resultaten bevinden zich binnen een factor 3,58 van de USEtox-resultaten (zie de rode lijnen in Figuur 7). De stof met de grootste afwijking tussen beide methoden is dinocap, een organisch fungicide. Over het algemeen vallen karakterisatiefactoren berekend door ReCiPe lager uit dan de factoren berekend via USEtox; 18% van de ReCiPe-eindpunten is hoger dan de USEtox-eindpunten.



Figuur 7: USEtox-eindpunten (in DALY per kg geëmitteerde stof) uitgezet tegen ReCiPe-eindpunten, niet gerelateerd aan carcinogeniteit van bestrijdingsmiddelen. De zwarte lijn geeft de 1:1 lijn weer. De rode lijnen geven het gebied weer waarin 50% van de data zich bevindt.

3.2.3 Zoetwaterecotoxiciteit

In totaal kunnen voor 281 bestrijdingsmiddelen karakterisatiefactoren uit USEtox worden vergeleken met dezelfde eindfactoren uit ReCiPe. De hoogste karakterisatiefactor (en dus de grootste impact op het milieu), wordt door beide methoden berekend voor λ -cyhalotrin (USEtox: 0,0057 soortenverlies/m³/dag/kg geëmitteerde stof, ReCiPe: $3.35 \cdot 10^{-5}$ soortenverlies/m³/dag/kg geëmitteerde stof, Zie Figuur 8 in de bijlage), een insecticide gebruikt tegen spinnen en mijten. 50% van alle ReCiPe-resultaten bevindt zich binnen een factor 7,28 van de USEtox-resultaten (zie de rode lijn in het figuur hieronder). De stof met de grootste afwijking tussen beide methoden is bis(tri-N-butyltin)oxide. Over het algemeen vallen karakterisatiefactoren berekend door USEtox lager uit dan de factoren berekend via ReCiPe, net als in Rosenbaum et al. (2008).



Figuur 8: USEtox-eindpunten (in potentieel soortenverlies per m³ watervolume per dag per kg geëmitteerde stof) uitgezet tegen ReCiPe-eindpunten, gerelateerd aan ecotoxiciteit van bestrijdingsmiddelen. De zwarte lijn geeft de 1:1 lijn weer. De rode lijnen geven het gebied weer waarin 50% van de data zich bevindt.

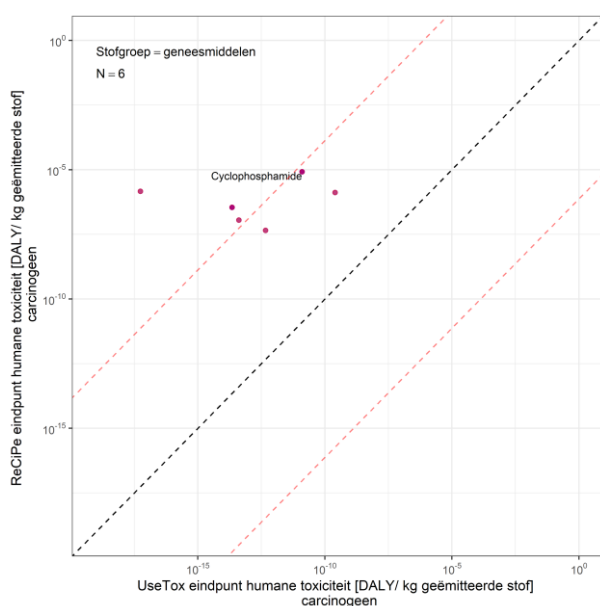
Resultaten (eindpunten) berekend door ReCiPe en USEtox voor non-carcinogene stoffen en ecotoxiciteit komen dus redelijk goed overeen voor bestrijdingsmiddelen, maar er zijn behoorlijk wat discrepanties tussen schattingen m.b.t. carcinogene toxiciteit tussen beide methoden.

3.3 Geneesmiddelen

Een lijst van geneesmiddelen is opgesteld aan de hand van beschikbare concentratiedata in rioolwaterzuiveringen en oppervlaktewateren (beken). Van deze 44 geneesmiddelen zijn er voor in totaal 14 stoffen in USEtox en/of ReCiPe 2016 data beschikbaar. In totaal konden 6 carcinogene eindpunten (Figuur 9) en 5 ecotoxiciteitseindpunten (zoetwater; Figuur 10) voor geneesmiddelen worden vergeleken.

3.3.1 Carcinogene toxiciteit

In totaal kunnen voor zes geneesmiddelen karakterisatiefactoren m.b.t. carcinogeniteit via USEtox worden vergeleken met dezelfde eindpunten via ReCiPe. De hoogste karakterisatiefactor (en dus de grootste kankerverwekkende potentie), wordt door ReCiPe berekend voor cyclofosfamide ($8,36 \cdot 10^{-6}$ DALY per kg geëmitteerde stof), een middel dat wordt gebruikt bij de behandeling van o.a. borst- en eierstokkanker (Figuur 10 en Figuur S4 in de bijlage). 50% van alle ReCiPe-resultaten bevindt zich binnen een factor 6,13 van de USEtox-resultaten (zie de rode lijnen in Figuur 9). De stof met de grootste afwijking tussen beide methoden is albuterol, een astmamedicijn. Over het algemeen vallen karakterisatiefactoren berekend door USEtox lager uit dan de factoren berekend via ReCiPe; geen van de USEtox-eindpunten is hoger dan de ReCiPe-eindpunten.



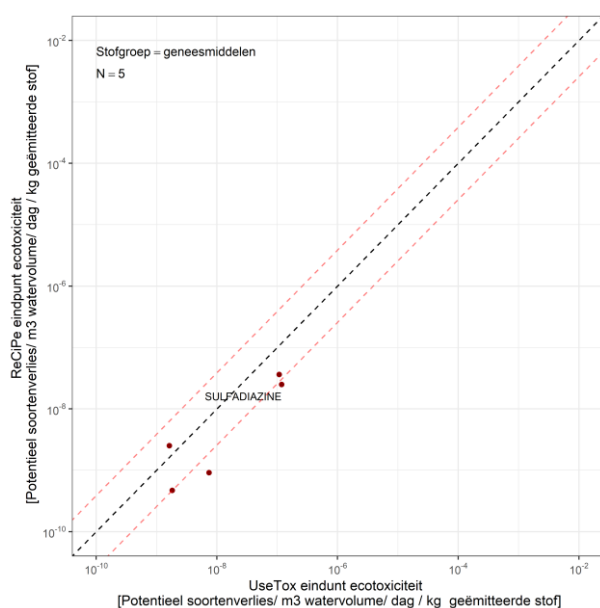
Figuur 9: USEtox-eindpunten (in DALY per kg geëmitteerde stof) uitgezet tegen ReCiPe-eindpunten, niet gerelateerd aan carcinogeniteit van geneesmiddelen. De zwarte lijn geeft de 1:1 lijn weer. De rode lijnen geven het gebied weer waarin 50% van de data zich bevindt. Verschillen tussen eindpunten berekend door ReCiPe en USEtox zijn onder andere te verklaren door de factoren die in Tabel 3 zijn benoemd.

3.3.2 Non-carcinogene toxiciteit

Voor non-carcinogene toxiciteit was het niet mogelijk om USEtox-resultaten te vergelijken met ReCiPe-resultaten, gezien het gebrek aan ReCiPe-resultaten voor non-carcinogene toxiciteit voor geneesmiddelen. Voor vijf geneesmiddelen konden via USEtox non-carcinogene eindpunten gegenereerd worden. De hoogste karakterisatiefactor (en dus de grootste ziekmakende potentie), wordt door USEtox berekend voor diclofenac ($7.56 \cdot 10^{-5}$ DALY per kg geëmitteerde stof; Figuur S5 in de bijlage).

3.3.3 Zoetwaterecotoxiciteit

In totaal kunnen voor vijf geneesmiddelen karakterisatiefactoren uit USEtox worden vergeleken met dezelfde eindfactoren uit ReCiPe, aangezien voor een groot deel van de data geen ED_{50} s beschikbaar zijn voor aquatische organismen. De hoogste karakterisatiefactor (en dus de grootste impact op het milieu), wordt door beide methoden berekend voor sulfadiazine (USEtox: $1,18 \cdot 10^{-7}$ soortenverlies/ m^3 /dag/kg geëmitteerde stof, ReCiPe: $2,5 \cdot 10^{-8}$ soortenverlies/ m^3 /dag/kg geëmitteerde stof, zie Figuur 10 en Figuur S6 in de bijlage). 50% van alle ReCiPe-resultaten bevindt zich binnen een factor 3,87 van de USEtox-resultaten (zie de rode lijn in het figuur hieronder). De stof met de grootste afwijking tussen beide methoden is trimethoprim (een factor van 8,08).



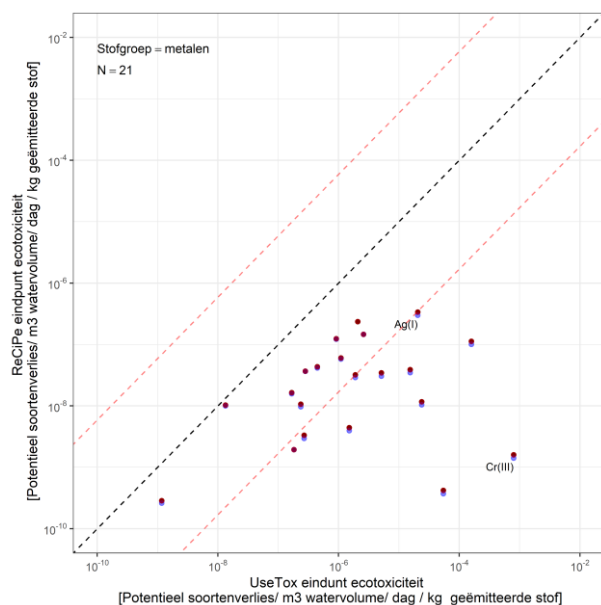
Figuur 10: USEtox-eindpunten (in potentieel soortenverlies per m³ watervolume per dag per kg geëmitteerde stof) uitgezet tegen ReCiPe-eindpunten, gerelateerd aan ecotoxiciteit van geneesmiddelen. De zwarte lijn geeft de 1:1 lijn weer. De rode lijnen geven het gebied weer waarin 50% van de data zich bevindt.

3.4 Zware metalen

Voor 21 zware metalen zijn data beschikbaar om de USEtox- en ReCiPe-methoden te kunnen vergelijken. Omdat humane toxiciteit in USEtox en ReCiPe wordt bepaald door de octanol-water partitiëcoëfficiënt (een maat voor hydrofobiciteit) en deze niet bekend is voor zware metalen, kan bioaccumulatie in de mens via water en bodem niet berekend worden. Om deze reden kan voor zware metalen enkel gekeken worden naar ecotoxische effecten. In totaal konden voor 21 metalen karakterisatiefactoren gerelateerd aan ecotoxiciteit in zoetwater (Figuur 11), berekend door beide effectbeoordelingsmodellen, worden vergeleken.

3.4.1 Zoetwaterecotoxiciteit

In totaal kunnen voor 21 metalen karakterisatiefactoren uit USEtox worden vergeleken met dezelfde eindfactoren uit ReCiPe. De hoogste karakterisatiefactor (en dus de grootste potentiële impact op het milieu), wordt door USEtox berekend voor Cr(III), Chroom-3 ($7,95 \cdot 10^{-4}$ soortenverlies/m³/dag/kg geëmitteerde stof). Waterververontreiniging met chroom wordt niet als een acuut milieuprobleem beschouwd. De geringe oplosbaarheid van chroom(III)oxides beperkt de in natuurlijke wateren voorkomende concentraties aan chroom. Cr³⁺-ionen zijn bij pH-waardes boven de 5 bijna niet in water aanwezig, omdat het gehydrateerde oxide Cr(OH)₃ heel slecht in water oplosbaar is. De hoogste karakterisatiefactor berekend door ReCiPe komt uit op Ag(I), zilver ($3,37 \cdot 10^{-7}$ soortenverlies/m³/dag/kg geëmitteerde stof, Figuur 11 en Figuur S7 in de Bijlage), waarvan bekend is dat deze met name op bacteriën een slechte invloed heeft. 50% van alle ReCiPe-resultaten bevindt zich binnen een factor 50,06 van de USEtox-resultaten (zie de rode lijn in het figuur hieronder). De stof met de grootste afwijking tussen beide methoden is Cr(iii) (een erg hoge factor van 497061).



Figuur 11: USEtox-eindpunten (in potentieel soortenverlies per m^3 watervolume per dag per kg geëmitteerde stof) uitgezet tegen ReCiPe-eindpunten, gerelateerd aan ecotoxiciteit van zware metalen. De zwarte lijn geeft de 1:1 lijn weer. De rode lijnen geven het gebied weer waarin 50% van de data zich bevindt.

4 Uitdrukken milieu-impact in ecopunten en CO₂-equivalenten

4.1 Berekening milieu-impact in ecopunten

De karakterisatiefactoren voor ecotoxiciteit en humane toxiciteit kunnen berekend worden met zowel het USEtox-model als het ReCiPe-model (Zie Hoofdstuk 2 en 3). Met deze modellen zijn de karakterisatiefactoren voor humane toxiciteit (zowel carcinogeen, als non-carcinogeen) en ecotoxiciteit van bestrijdingsmiddelen, geneesmiddelen en metalen bepaald (zie Hoofdstuk 3). Deze karakterisatiefactoren kunnen vervolgens omgerekend worden naar ecopunten, waarbij 1000 ecopunten overeenkomen met de milieu-impact van één West-Europeaan in één jaar. Het omrekenen van de karakterisatiefactor voor humane (carcinogene/non-carcinogene) toxiciteit (in DALY/kg geëmitteerde stof) naar (milli-)ecopunten (mPt; formule 10) kan gedaan worden door het eindpunt te vermenigvuldigen met de volgende factor (f_{hum}): $1,69 \cdot 10^7$ mPt/DALY (Goedkoop et al., 2013).

$$HTP_{mPt} = HTP_{eind} \cdot f_{human} \quad [10]$$

waarin HTP_{mPt} wordt uitgedrukt in mPt/kg geëmitteerde stof. Vervolgens kan het totale effect van de individuele stoffen ($HTP_{x,mPt,effluent}$ in mPt/m³) op de humane gezondheid (carcinogeniteit/non-carcinogeniteit) berekend worden via:

$$HTP_{x,mPt,effluent} = HTP_{mPt} \cdot C_{x,effluent} \quad [11]$$

waarin de concentratie in het effluent van stof x ($C_{x,effluent}$) wordt uitgedrukt in kg/m³. $HTP_{x,mPt,effluent}$ kan vervolgens opnieuw geconverteerd worden naar het totale effect van de individuele stoffen in DALY/m³ (dus niet DALY/kg geëmitteerde stof) via:

$$HTP_{x,DALY,effluent} = \frac{HTP_{x,mPt,effluent}}{f_{human}} \quad [12]$$

Voor ecotoxiciteit gaat een vergelijkbare methodiek op (formule 13). Hier kan de karakterisatiefactor bepaald worden door de PAF-waarde (soortenverlies/jaar) van een compartiment (bijvoorbeeld zoetwater) te vermenigvuldigen met de soortendichtheid in hetzelfde compartiment (zie voor de complete berekening Hoofdstuk 2.2 - ecotoxiciteit). Het omrekenen van de karakterisatiefactor voor ecotoxiciteit (in PDF/jaar/kg geëmitteerde stof) naar (milli-)ecopunten kan dan met de volgende factor (f_{eco}): $2,70 \cdot 10^8$ mPt/PDF (Goedkoop et al., 2013).

$$ETP_{mPt} = ETP_{eind} \cdot f_{eco} \quad [13]$$

waarin ETP_{mPt} wordt uitgedrukt in mPt/kg geëmitteerde stof. Vervolgens kan het totale effect van de individuele stoffen ($ETP_{x,effluent}$ in mPt/m³) op het milieu (ecotoxiciteit) berekend worden via:

$$ETP_{x,effluent} = ETP_{mPt} \cdot C_{x,effluent} \quad [14]$$

waarin de concentratie in het effluent van stof x ($C_{x,effluent}$) wordt uitgedrukt in kg/m³. ETP_x , mPt, effluent kan vervolgens opnieuw geconverteerd worden naar het totale effect van de individuele stoffen in soortenverlies/m³ via:

$$ETP_{x,PDF,effluent} = \frac{ETP_{x,mPt,effluent}}{f_{eco}} \quad [15]$$

Het gecombineerde effect (humane toxiciteit of ecotoxiciteit) van meerdere stoffen (in milli-ecopunten) kan worden opgeteld bij de traditionele milieu-impactanalyse van een RWZI, gebaseerd op enkel energieverbruik, broeikasemissies en chemicaliënverbruik om de totale milieu-impact door stoffen in het effluent te berekenen.

Omrekenen naar CO₂-equivalenten

Veel bedrijven en instanties werken met de CO₂-voetafdruk, zo ook in de watersector. Drinkwaterbedrijven werken aan klimaatneutraliteit door de emissies in scope 1 in CO₂-voetafdruk te bepalen, zoals gedefinieerd in het Green House Gas Protocol, de internationale standaard om broeikasgasemissies te kwantificeren (World Resources Institute, 2004). Wanneer we nu de waterkwaliteit mee zouden willen nemen, kan het handig zijn om aan te sluiten in dezelfde systematiek. Dit is niet helemaal overeenkomstig met de werkelijkheid, omdat bij de emissie van een medicijn naar water, geen CO₂ vrijkomt. Echter is dit wél een mogelijkheid om de ernst van de emissie mee te kunnen wegen.

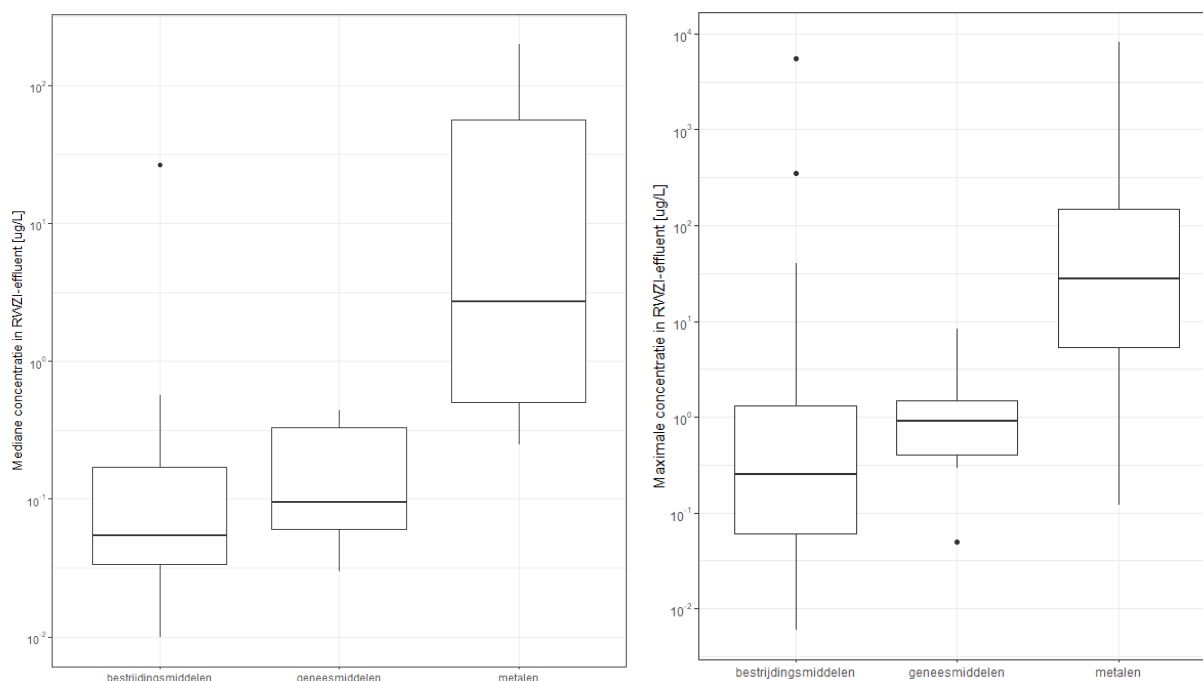
Uit ReCiPe 2016 kunnen de volgende omrekenfactoren gehaald worden voor ecotoxiciteit ($2,80 \cdot 10^{-9}$ species.year/kg CO₂) en humane toxiciteit ($9,28 \cdot 10^{-7}$ DALY/kg CO₂). Met de toxiciteitgegevens van de bestrijdingsmiddelen, geneesmiddelen en metalen kan worden vastgesteld wat de fictieve CO₂-uitstoot van deze stofgroepen is door $ETP_{x,PDF,effluent}$ en $ETP_{x,DALY,effluent}$ op te tellen bij de totale impact (in ecopunten) van de RWZI en vervolgens te delen door de conversiefactoren voor humane toxiciteit en ecotoxiciteit (f_{human} en f_{eco}) om het toegevoegde effect door de stof uit te drukken in DALY (het aantal jaar dat verloren gaat ten gevolge van ziekte, handicap of vroege dood) en PDF (potentieel verdwijnende soorten), respectievelijk. Deze waarden kunnen worden omgerekend naar CO₂-equivalenten (in kg CO₂) door de waarden te delen door voorgenoemde CO₂-omrekenfactoren voor ecotoxiciteit en humane toxiciteit. Deze CO₂ veroorzaakt door RWZI-emissies van de stoffen en stofgroepen in deze studie kunnen worden toegevoegd aan de CO₂-voetafdruk op basis van broeikasgassen en energie- en chemicaliënverbruik in de RWZI om een idee te krijgen van de totale CO₂-voetafdruk van de RWZI door de individuele stoffen en/of stofgroepen.

4.2 Toegepast in een casus (de RWZI van Amsterdam-West)

Ter toetsing of de uitkomsten van USEtox en/of ReCiPe gekoppeld kunnen worden aan een LCA-berekening én of de mogelijkheid om waterkwaliteit mee te nemen relevant is, is een LCA-studie uitgevoerd met dezelfde stoffen en stofgroepen als in Hoofdstuk 3. Hiervoor is een milieu-impactstudie uitgevoerd voor het behandelen van 1m^3 afvalwater in de RWZI Amsterdam-West. De impact van infrastructuur is buiten beschouwing gelaten, omdat die doorgaans verwaarloosbaar is. De gegevens voor waterkwaliteit, broeikasgasemissies, energie en chemicaliënverbruik zijn afkomstig uit het technisch jaarverslag Waternet 2013. De enige effluentparameters die tot op heden meegenomen werden zijn stikstof- en fosfaatemissie.

De totale milieu-impact van de RWZI Amsterdam-West is $4.55 \cdot 10^{-7}$ DALY (humane toxiciteit) en $9,93 \cdot 10^{-10}$ potentieel verdwijnende soorten per jaar (ecotoxiciteit), berekend door gebruik te maken van ReCiPe 2016 (v.1.08), Ecolnvent 3.8 en Simapro 9.4.0.2. Soms is het gewenst de milieu-impact in één eenheid uit te drukken: daar kunnen bijvoorbeeld ecopunten voor worden gebruikt (Zie Hoofdstuk 4.1). In dat geval is het milieu-impact $6,57 \cdot 10^{-3}$ Pt per m^3 behandeld afvalwater, waarbij 1.000 Pt is vastgesteld als de gemiddelde impact van een persoon in West-Europa per jaar (Pré Consultants, 2000).

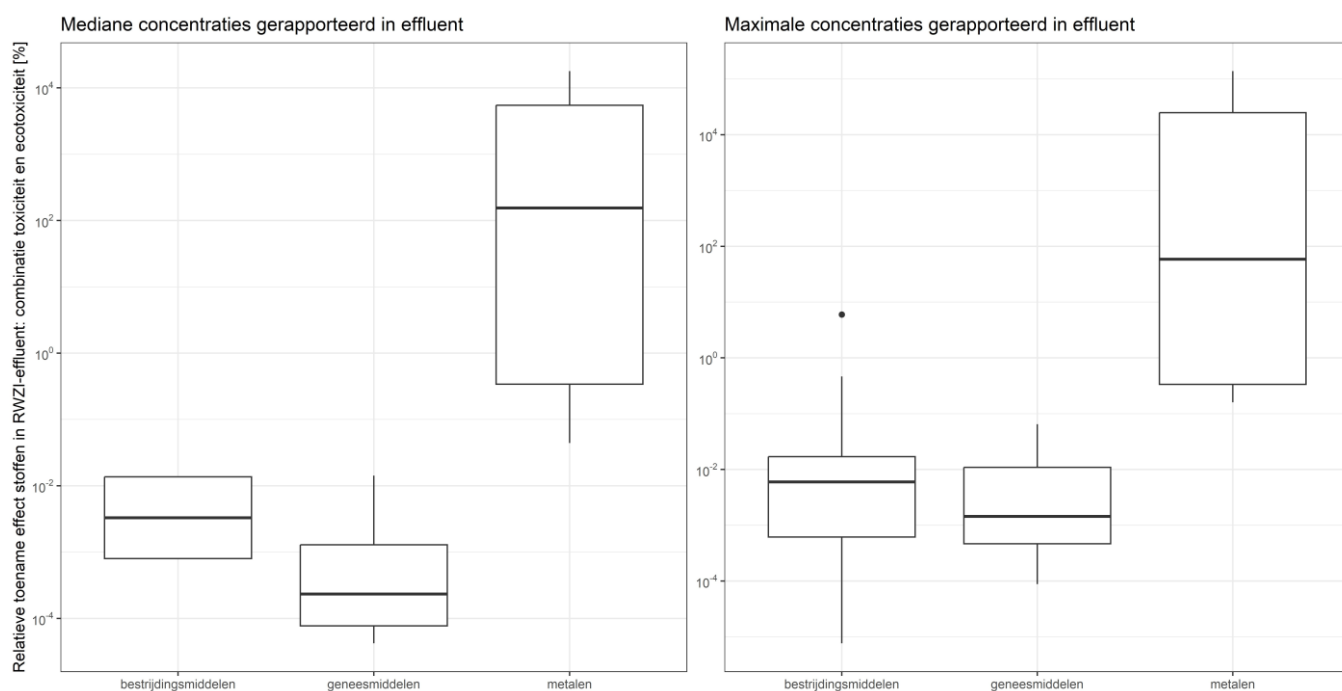
Om de totale impact en de CO_2 -voetafdruk van alle stoffen die in Hoofdstuk 3 zijn meegenomen te kunnen berekenen, is het van belang om informatie te hebben over de concentraties van deze stoffen in effluent (formule 11 en 14, Hoofdstuk 4.1). Deze concentraties zijn verzameld uit de Watson Database (een database met concentraties van microverontreinigingen in influent en effluent in Nederlandse RWZI's), aangevuld met concentratiedata uit effluënten van RWZI's verzameld door KWR. De dataset met meetgegevens van concentraties in effluent van RWZI Amsterdam-Westpoort bevat te weinig informatie om iets zinnigs te zeggen over het effect van alle bestrijdingsmiddelen, geneesmiddelen en metalen. Daarnaast valt in veel gevallen de concentratie van de stof onder de detectielimiet, waardoor deze data onbruikbaar zijn. Om deze reden is ervoor gekozen om zowel de mediaan van alle concentraties als de maximale concentratie in de data voor alle gemonitorde RWZI's in Nederland (meer dan 500 individuele RWZI's) in de Watson Database te gebruiken, zodat zowel continue belasting als piekbelastingen kunnen worden doorgerekend. Gemiddeld worden de hoogste concentraties gevonden voor metalen (Figuur 12), gevolgd door geneesmiddelen en bestrijdingsmiddelen.



Figuur 12: Boxplot met mediane (links) en maximale (rechts) concentraties in RWZI-effluent per stofgroep, gebaseerd op mediane gemeten concentraties per locatie, voor 267 locaties, 308 bestrijdingsmiddelen, 14 geneesmiddelen en 27 metalen, tussen 1990 en 2018.

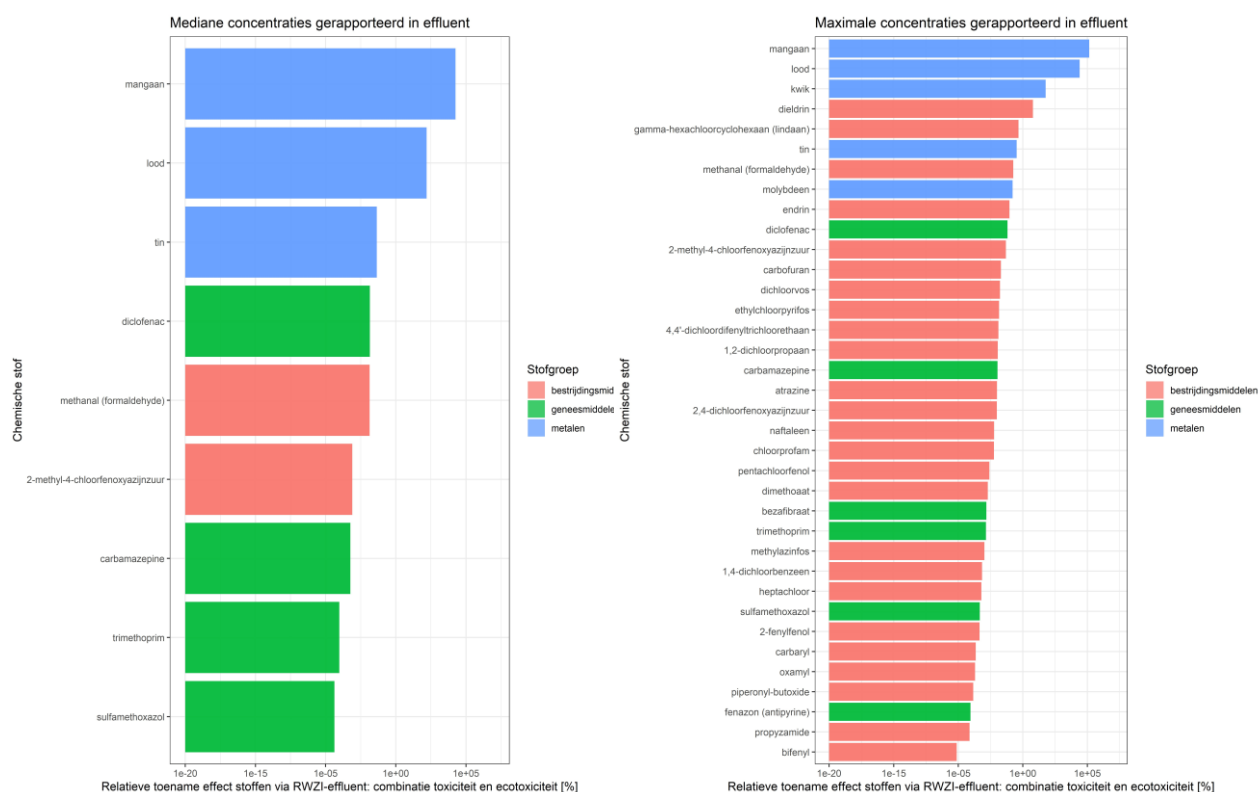
Om een uitspraak te kunnen doen over de impact van individuele stoffen is echter tevens informatie nodig over berekende toxiciteits- en ecotoxiciteitseindpunten. In dit rapport zijn initieel enkel eindpunten uit USEtox meegenomen. Indien deze niet beschikbaar zijn voor stoffen binnen de geteste stofcategorieën, is er gekozen voor eindpunten uit ReCiPe. Vervolgens hebben we de milieu-impact van de lijst bestrijdingsmiddelen, geneesmiddelen en metalen meegewogen in de totale milieu-impact van een afvalwaterzuivering, waarbij gekeken is naar mediane concentraties van stoffen en maximale concentraties (piekbelasting)(Figuur 13). In werkelijkheid zijn er veel meer stoffen die via het effluent geëmitteerd worden, die niet worden meegenomen in het bepalen van de milieu-impact. We houden het hier simpel om daarmee alleen de technische mogelijkheid en het belang van waterkwaliteitsvoetafdruk in kaart te brengen.

De grootste impact op de waterkwaliteit van RWZI-effluent wordt in beide scenario's (gemiddelde en tijdens piekbelasting) veroorzaakt door metalen (waarbij respectievelijk de mediane concentratie per stof en de maximale concentratie per stof worden meegenomen) (Figuur 12). Deze hoge impact wordt hoogstwaarschijnlijk veroorzaakt door een combinatie van relatief hoge eindpunten voor carcinogeniteit, non-carcinogeniteit en ecotoxiciteit, en de hoge concentraties van zware metalen die in het effluent worden aangetroffen (Figuur 12). Waar bestrijdingsmiddelen en geneesmiddelen respectievelijk gemiddeld voor een toename van 0,00033% en 0,0025% (mediane concentraties) en 0,16% en 0,013% (maximale concentraties) per stof zorgen, loopt dit voor metalen op tot 3600% (mediane concentraties) en 37000% (maximale concentraties).



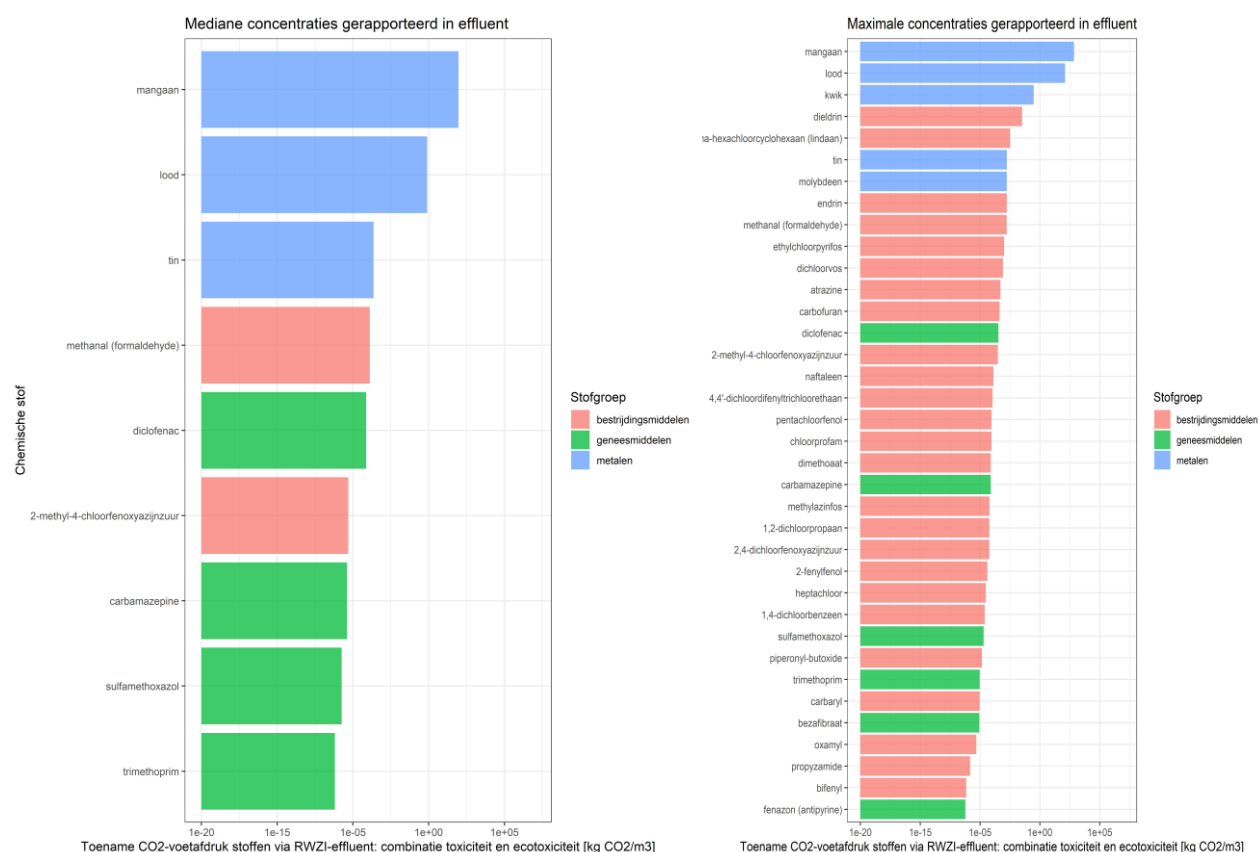
Figuur 13: Relatieve toename effecten in het totale effect van de RWZI (inclusief effecten veroorzaakt door chemicaliëngebruik en energieverbruik) door uitstroom van stoffen in RWZI-effluent, waarbij ecotoxische effecten en humaan toxische effecten zijn gecombineerd, gebaseerd op mediane concentraties (links) maximale concentraties (rechts) voor stoffen gemeten in effluent per RWZI per jaar.

Zoals eerder benoemd, liggen veel concentratiedata voor veel stoffen onder de detectielimiet, zelfs wanneer alle RWZI's in de Watson database worden meegenomen. Hierdoor zijn slechts voor enkele stoffen risico's te verwachten als deze worden beoordeeld op basis van de mediaan van de gemeten effluentconcentraties per RWZI en per jaar (Figuur 14-links). In beide situaties wordt dit voornamelijk veroorzaakt door mangaan en lood.



Figuur 14: Relatieve toename effecten door uitstroom van stoffen in RWZI-effluent, waarbij ecotoxische effecten en humaan-toxische effecten zijn gecombineerd, gebaseerd op mediane concentraties (links) maximale concentraties (rechts) voor stoffen gemeten in effluent per RWZI per jaar.

Ook wanneer het effect wordt uitgedrukt in CO₂-equivalenten (zie paragraaf 4.1), wordt de grootste impact op de waterkwaliteit van het RWZI-effluent veroorzaakt door metalen in beide scenario's (waarbij enerzijds het mediane concentratie per stof (constante belasting) en anderzijds de maximale concentratie per stof (piekbelasting) wordt meegenomen) (Figuur 15). In beide situaties wordt dit voornamelijk veroorzaakt door mangaan, lood, tin en kwik.



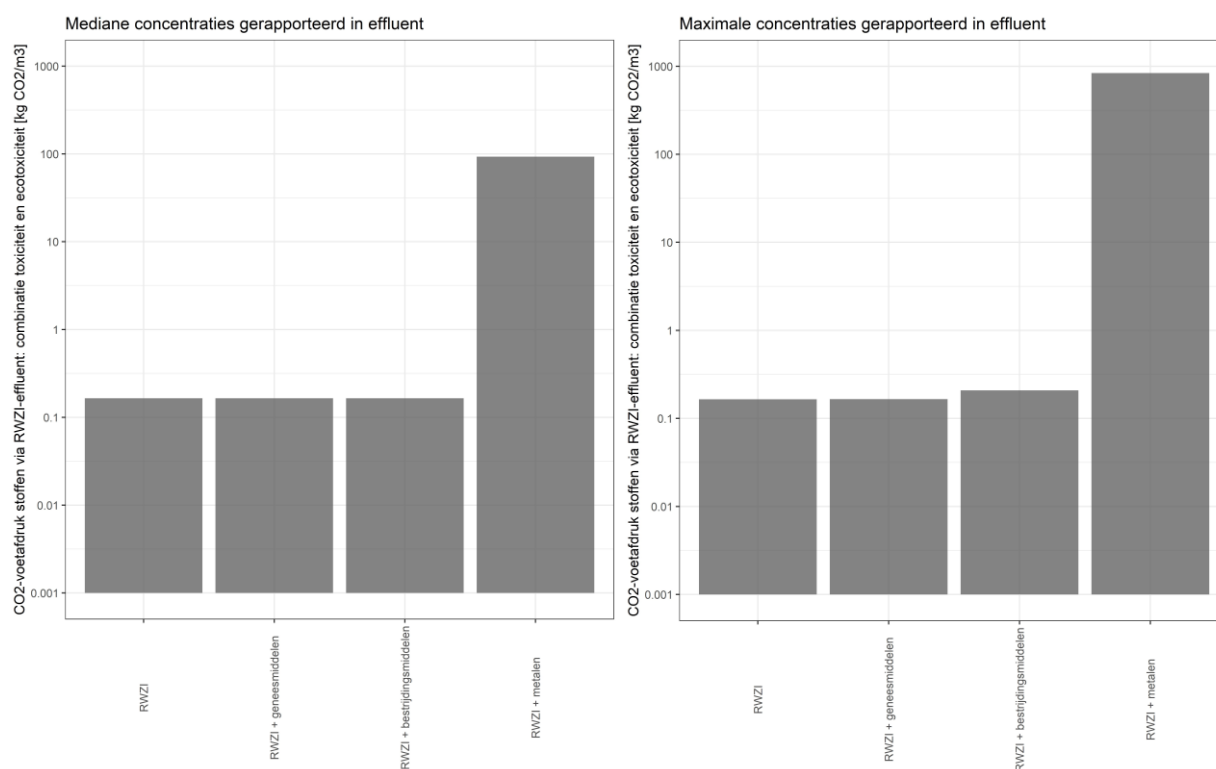
Figuur 15: Toename in CO₂-voetafdruk door uitstroom van individuele stoffen in RWZI-effluent, waarbij ecotoxische effecten en humantoxische effecten zijn gecombineerd, gebaseerd op mediane concentraties (links) maximale concentraties (rechts) voor stoffen gemeten in effluent per RWZI per jaar.

De totale CO₂-voetafdruk van de RWZI is 0,214 kg CO₂/m³. In onderstaande tabel en Figuur 16 staat weergegeven wat het meewegen van de individuele stofgroepen in deze studie voor gevolg heeft voor de CO₂-voetafdruk van de RWZI. De impact wordt dus sterk beïnvloed door het meenemen van de effluentkwaliteit.

Tabel 5: Toename in CO₂-voetafdruk veroorzaakt door stoffen in het effluent, gesommeerd per stofgroep.

Stofgroep	Som CO ₂ -voetafdruk (mediane concentraties) (kg/m ³)	Som CO ₂ -voetafdruk (maximale concentraties) (kg/m ³)	Relatieve toename CO ₂ -voetafdruk t.o.v. RWZI (mediane concentraties)	Relatieve toename CO ₂ -voetafdruk t.o.v. RWZI (maximale concentraties)
Bestrijdingsmiddelen	1,33E-04	1,99E-03	8,06E-04	1,21E-02
Geneesmiddelen	8,15E-04	4,47E-04	4,94E-04	2,71E-03
Metalen	9,27E+01	8,37E+02	5,61E+02	5,07E+03

In memo "beknpte toelichting technische koppeling van toxiciteit gegevens aan milieustudies: van 5 december 2023 wordt een beknpte toelichting gegeven over de technische koppeling in toxiciteitgegevens aan milieustudies. Deze is toegevoegd als bijlage II.



Figuur 16 Milieu-impact RWZI Amsterdam West (uitgedrukt in CO₂-equivalenten), inclusief de invloed van individuele stofgroepen, gebaseerd op mediane concentraties in effluent (links) en gebaseerd op maximale concentraties in effluent (rechts).

5 Discussie, perspectief en conclusie

5.1 Discussie

In dit verkennend onderzoek is gekeken naar de mogelijkheid om de stoffen in RWZI-effluent mee te wegen in de milieu-impactanalyse. Hiervoor worden deze effecten zowel uitgedrukt in (milli)ecopunten (per m³ effluent) als in CO₂-equivalenten. Uitkomsten van deze berekeningen laten zien dat de effluentkwaliteit een significante impact kan hebben, en illustreren dat het meenemen van individuele stoffen in het effluent van RWZI's al tot een completer beeld van de totale milieu-impact van de RWZI leidt, afhankelijk van de gekozen indicator. Door de impact van de (verminderde) emissie van stoffen niet mee te nemen in de milieu-impactanalyse ontstaat een onvolledig beeld van de milieu-impact en is de uitkomst daardoor deels niet bruikbaar, zeker wanneer het doel van de milieu-impactanalyse is om waterzuiveringstechnieken te evalueren. Hoewel de huidige methode om de waterkwaliteitsvoetafdruk te berekenen nog erg complex is, pleit dit ervoor om niet langer alleen beleid te voeren t.b.v. klimaatneutraliteit op reductie van energie en chemicaliënverbruik, maar ook de waterkwaliteitsvoetafdruk hierin mee te nemen. Het is daarbij belangrijk de stakeholders zorgvuldig mee te nemen in deze verschuiving, maar ook handvatten te bieden om dit in te bouwen in besluitvorming. Enkele ideeën hiertoe en voor optimalisatie van de milieu-impact-analyse t.b.v. de (drink)watersector zijn opgenomen in onderstaande paragraaf.

Hoewel het huidige verkennend onderzoek heeft aangetoond dat effecten van stoffen in het effluent meegenomen kunnen worden, zijn er toch enkele punten van discussie. Zo blijkt uit dit onderzoek dat het gebruik van verschillende milieu-impactmethodieken leidt tot verschillende resultaten (karakterisatiefactoren), waartussen soms grote verschillen worden gezien. De belangrijkste verschillen zijn opgesomd in Tabel 3 in paragraaf 2.3. Het belangrijkste verschil tussen beide methoden is dat in ReCiPe 2016 gebruik wordt gemaakt van het multimedia-model van USES-LCA, terwijl USEtox in 2005 is ontwikkeld als consensusmodel waarin – tot toen – veelgebruikte methoden (waaronder USES-LCA) zijn geharmoniseerd. Hoofdstuk 3 laat zien dat de ReCiPe-resultaten (eindpunten) over het algemeen hoger uitvallen dan de USEtox-resultaten en wellicht dus conservatiever zijn. In USEtox worden echter veel meer stoffen meegenomen en wordt rekening gehouden met meer blootstellingsroutes en compartimenten (inclusief het nieuwe RWZI-compartiment, welke in ReCiPe volledig mist). Beide methodieken nemen dus transport van stoffen tussen milieucompartimenten (b.v. lucht, water en bodem) mee, maar in het huidige onderzoek is enkel gekeken naar de emissie van stoffen van RWZI naar oppervlaktewater. In een toekomstig onderzoek kan mogelijk ook gekeken worden naar het te verwachten transport naar (en effecten in) andere compartimenten. Ook kan – naast de chemische waterkwaliteit, en de verbetering daarvan – gekeken worden naar eventuele verbetering van de microbiologische waterkwaliteit en kan de kwetsbaarheid van het ontvangende water gekwantificeerd en meegenomen worden. Voor nu geniet het de voorkeur om ecotoxiciteit en humane toxiciteit vast te stellen met behulp van de USEtox-methode (consensusmodel), en indien gewenst in te bouwen in de ReCiPe-methode om de waterkwaliteitsvoetafdruk uit te drukken in CO₂-equivalenten (zoals gedaan in het voorbeeld beschreven in hoofdstuk 4).

In dit onderzoek is een eerste inventarisatie gedaan van de mogelijkheden om het effect van stoffen in het effluent van de RWZI mee te nemen in de totale milieu-impact, bovenop de toetsing op basis van de gebruikelijke informatie over de infrastructuur en het energie- en chemicaliëngebruik. Er is echter veel ruimte voor uitbreiding op het gebied van stoffen in de toekomst. In de huidige beschreven methodiek in dit rapport zijn diverse methodieken en databases gekoppeld, waarin de parameters elk een eigen mate van onzekerheid met zich meebrengen. Deze onzekerheid is vaak slecht gerapporteerd en werkt mogelijk door in de berekeningen. Wanneer deze onzekerheid in de

voorspellingen beter in beeld is gebracht, kunnen de milieu-impactmethodieken in de toekomst worden gekoppeld aan andere modellen zodat bijvoorbeeld de directe impact van zuivering(stechnieken) op de waterkwaliteit - en dus de milieu-impact - beter in beeld kunnen worden gebracht.

De methodieken beschreven in dit rapport kunnen worden gebruikt om een raamwerk te maken om best beschikbare zuiveringstechnieken te identificeren. Nu we in dit verkennend onderzoek hebben laten zien dat technische koppeling mogelijk is, zijn een aantal vervolgstappen interessant. Deze zijn onder *Perspectief* beschreven.

5.2 Perspectief en conclusie

Nu in dit verkennend onderzoek is gedemonstreerd dat er een technische koppeling mogelijk is tussen verschillende vaststellingsmethodieken kan deze kennis op verschillende manieren ingezet worden. Hieronder een niet-uitputtend overzicht van mogelijkheden gegeven.

1. USEtox maakt gebruik van een vaste set gegevens om de toxiciteit van een stof te bepalen. Deze gegevens betreffen EC₅₀s, maar ook fysisch-chemische descriptoren gerelateerd aan mobiliteit en persistentie van stoffen. Als deze gegevens bekend zijn, kan met de USEtox-methode de toxiciteit van stoffen worden vastgesteld, en meegenomen worden in andere milieu-impact rekenmethodieken. Echter het kan ook voorkomen dat (toxiciteits)gegevens helemaal niet bekend zijn voor stoffen. Met behulp van quantitative structure activity relationships (QSARs) kunnen deze gegevens geschat worden. Er wordt dan gebruik gemaakt van de gelijkenis van chemische structuurgroepen, om zo een voorspelling te doen van een mate van gelijkenis in effecten. Uiteraard is dit niet een vaststelling van toxiciteitgegevens, maar kan dit wel ingezet worden om een indicatie van milieu-impact vast te stellen. Dit kan bijdragen aan het beoordelen of het interessant is om de toxiciteit van de stof verder experimenteel te onderzoeken (bij veel impact) of juist niet (bij lage impact).
2. Recentelijk is er een nieuw geluid ontstaan binnen de waterschappen, waarbij is vastgesteld dat de focus met betrekking tot reductie van milieu-impact niet langer alleen op de reductie van energie en chemicaliën moet liggen, maar dat ook de effluentkwaliteit meegenomen moet worden. Ook in dit verkennend onderzoek wordt dat beeld bevestigd. Het is daarom belangrijk om dit signaal zorgvuldig te communiceren. Verder onderzoek kan namelijk uitwijzen dat een hoger chemicaliën en energieverbruik de effluentkwaliteit significant verbetert, en dat daarmee netto een hogere milieuwinst wordt gehaald. Het is dan ook interessant om dit als een 'break-even-point' benadering te beschouwen. Wanneer het milieueffect van het effluent vastgesteld is, kan onderzocht worden welke techniek (met bijbehorende energie- en chemicaliënconsumptie) passend is om deze effluentkwaliteit te verbeteren.

Dit is een tegenovergesteld beeld dan tot op heden te zien was. Quartaire (aanvullende) zuivering wordt vaak (mogelijk onterecht) bestemd met een hoge milieu-last. Dit is wél correct wanneer alleen naar de energie- en chemicaliënconsumptie wordt gekeken, maar is mogelijk niet correct wanneer de waterkwaliteitsverbetering ten gevolge van het proces wordt meegenomen. Omdat het tot recentelijk niet mogelijk was om de verbeterde waterkwaliteit uit te drukken in milieuwinsten (door gebrek aan gegevens), kon de gerealiseerde waterkwaliteitsverbetering dan ook niet positief opgevoerd worden. Hierdoor wordt het voor technologieleveranciers mogelijk om de positieve effecten van een additionele zuiveringstechnologie in kaart te brengen en op een eerlijke manier af te wegen.

Op basis van uitkomsten (ecopunten en/of CO₂-equivalenten) berekend middels deze methodieken kunnen stoffen geselecteerd worden die mogelijk een probleem vormen voor mens en milieu, door hun toxiciteit of door de gevonden concentraties in het effluent. Op basis daarvan kunnen geschikte zuiveringstechnieken worden geselecteerd om deze stoffen te zuiveren, waarbij tevens het energie- en chemicaliëngebruik van deze technieken kunnen worden afgewogen. Hierbij kunnen meerdere systemen en scenario's worden doorgerekend.

3. Dit onderzoek heeft aangetoond dat de milieu-impact van lozing van stoffen mede bepaald wordt door het compartiment waarin geloosd wordt. Een compartiment is een algemene benaming voor het ontvangende water- of bodemtype, zoals oppervlaktewater, grondwater, natuurlijke bodem of de bodem in de bebouwde kom. De milieu-impact wordt mede bepaald door het relatieve verschil in concentratie tussen de instroom en het compartiment zelf. De impact van het lozen van een stof met een concentratie van 10 mg/L in een compartiment met een concentratie 1 mg/L is, is hoger dan wanneer de concentratie van die stof in het ontvangende compartiment 9 mg/L is. Dit biedt twee perspectieven:
 - Doordat we nu de impact van lozing van een stof op het milieu voor verschillende compartimenten kunnen vaststellen, is het mogelijk om scenario's te onderzoeken waarbij er van verschillende compartimenten gebruik wordt gemaakt. Een goed voorbeeld hiervoor is membraanonderzoek. Het concentraat (afvalproduct) wat vrijkomt tijdens zuivering, wordt momenteel nog gezien als het verplaatsten van een afvalproduct van het ene naar het andere compartiment. Echter, doordat deze verplaatsing wel een milieu-effect teweeg kan brengen door het verschil in impact per compartiment, kan wel overwogen worden hoe het beste met dit afvalproduct om gegaan moet worden. Een ander scenariovoorbeeld dat overwogen kan worden is, is de locatiekeuze van het ontvangende water
 - Een andere mogelijkheid voor vervolgonderzoek is om een locatie specifieke milieu-impact te bepalen. In de huidige methodieken wordt met gemiddelde concentraties gemeten voor de compartimenten, maar wanneer de actuele stofconcentratie van het ontvangende compartiment wordt gemeten kan de échte lokale milieu-impact worden vastgesteld.
4. Niet alleen kan de milieu-impact van de lozing van stoffen op de waterkwaliteit worden vastgesteld; ook kan, wanneer dit verder ontwikkeld wordt, het effect op de milieukwaliteit van (potentiële) reststoffen worden vastgesteld.
5. Het koppelen van deze methodiek aan hydrologische modellen kan mogelijk bijdragen aan het gericht opsporen van de meest geschikte locatie(s) als innamepunt voor drinkwater. Dezelfde informatie is ook interessant voor waterschappen, aangezien op deze manier kwetsbare locaties kunnen worden geïdentificeerd, waarvan de waterkwaliteit door middel van additionele zuivering verbeterd kan worden. Dit is bijvoorbeeld ook zeer relevant met betrekking tot de Kaderrichtlijn Water die in 2000 van kracht is geworden (European Commissie, 2000). Het doel van deze richtlijn is om de kwaliteit van oppervlakte- en grondwater in Europa te verbeteren. Deze richtlijn bepaalt dat de Europese wateren in 2027 een goed (chemisch en biologisch) leefgebied moeten vormen voor de planten en dieren die er thuishoren. Chemische doelstellingen zijn momenteel direct te toetsen, maar de hier verkende methodiek kan ook bijdragen aan het toetsen van ecologische doelstellingen door biodiversiteitsverlies direct te koppelen aan waterkwaliteit.

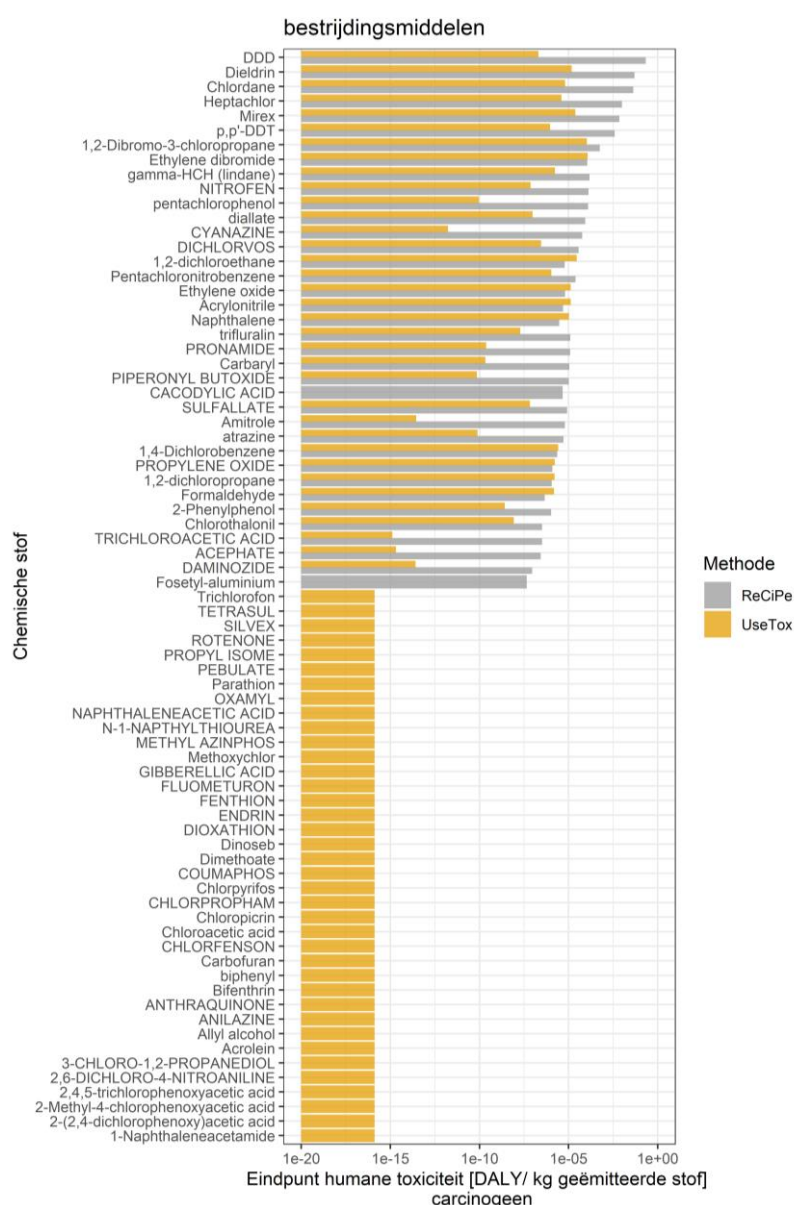
6 Referenties

- Acero, A. P., Rodríguez, C., & Ciroth, A. (2014). LCIA methods Impact assessment methods in Life Cycle Assessment and their impact categories. *GreenDelta GmbH, Berlin, Germany*, 23.
- Arnot, J. A., & Gobas, F. A. (2003). A generic QSAR for assessing the bioaccumulation potential of organic chemicals in aquatic food webs. *QSAR & Combinatorial Science*, 22(3), 337-345.
- Burkhard, L. P. (2000). Estimating dissolved organic carbon partition coefficients for nonionic organic chemicals. *Environmental science & technology*, 34(22), 4663-4668.
- Douziech, M. (2019). *Reliability in Chemical Footprint Modelling of Consumer Products*. Radboud University Nijmegen.
- European Commissie. (2000). Water Framework Directive (WFD) 2000/60/EC.
- Fantke, P., Aurisano, N., Bare, J., Backhaus, T., Bulle, C., Chapman, P. M., De Zwart, D., Dwyer, R., Ernststoff, A., & Golsteijn, L. (2018). Toward harmonizing ecotoxicity characterization in life cycle impact assessment. *Environmental toxicology and chemistry*, 37(12), 2955-2971.
- Fantke, P., Bijster, M., Guignard, C., Hauschild, M. Z., Huijbregts, M., Jolliet, O., Kounina, A., Magaud, V., Margni, M., & McKone, T. E. (2017). USEtox® 2.0 Documentation (Version 1.00).
- Fantke, P., Chiu, W. A., Aylward, L., Judson, R., Huang, L., Jang, S., Guin, T., Rhomberg, L., Aurisano, N., & McKone, T. (2021). Exposure and toxicity characterization of chemical emissions and chemicals in products: global recommendations and implementation in USEtox. *The International Journal of Life Cycle Assessment*, 26(5), 899-915.
- Golovko, O., Örn, S., Söregård, M., Frieberg, K., Nassazzi, W., Lai, F. Y., & Ahrens, L. (2021). Occurrence and removal of chemicals of emerging concern in wastewater treatment plants and their impact on receiving water systems. *Science of the total environment*, 754, 142122.
- Hauschild, M. Z., & Huijbregts, M. A. (2015). Introducing life cycle impact assessment *Life cycle impact assessment* (pp. 1-16): Springer.
- Hendriks, A. J., Smítková, H., & Huijbregts, M. A. J. (2007). A new twist on an old regression: Transfer of chemicals to beef and milk in human and ecological risk assessment. *Chemosphere*, 70(1), 46-56.
- Huijbregts, M. A. J. (1999). Priority Assessment of Toxic Substances in the frame of LCA. Development and application of the multi-media fate, exposure and effect model USES-LCA.
- Huijbregts, M. A. J., Rombouts, L. J. A., Ragas, A. M. J., & van de Meent, D. (2005). Human-toxicological effect and damage factors of carcinogenic and noncarcinogenic chemicals for life cycle impact assessment. *Integrated Environmental Assessment and Management: An International Journal*, 1(3), 181-244.
- Huijbregts, M. A. J., Steinmann, Z. J. N., Elshout, P. M. F., Stam, G., Verones, F., Vieira, M. D. M., Hollander, A., Zijp, M., & van Zelm, R. (2016). ReCiPe 2016: a harmonized life cycle impact assessment method at midpoint and endpoint level report I: characterization.
- Larsen, H., & Hauschild, M. (2007). Evaluation of Ecotoxicity Effect Indicators for Use in LCIA (10+ 4 pp). *The International Journal of Life Cycle Assessment*, 12(1), 24-33.
- Motejlová, H., & Koci, V. (2011). Application of 1, 4-dichlorobenzene as a reference substance in the LCA methodology (life cycle assessment). *Acta Environmentalica Universitatis Comenianae (Bratislava)*, 19, 243-246.
- Posthuma, L., de Zwart, D., & Dyer, S. D. (2019). Chemical mixtures affect freshwater species assemblages: from problems to solutions. *Current Opinion in Environmental Science & Health*, 11, 78-89.
- Pré Consultants. (2000). *Eco-indicator 99: manual for designers*. Retrieved from <https://pre-sustainability.com/articles/recipe/>
- Rebello, T. A., Roque, R. P., Gonçalves, R. F., Calmon, J. L., & Queiroz, L. M. (2020). Life cycle assessment of urban wastewater treatment plants: a critical analysis and guideline proposal. *Water Science and Technology*, 83(3), 501-514. doi:10.2166/wst.2020.608
- Rosenbaum, R. K. (2015). Ecotoxicity *Life cycle impact assessment* (pp. 139-162): Springer.
- Rosenbaum, R. K., Bachmann, T. M., Gold, L. S., Huijbregts, M. A., Jolliet, O., Juraske, R., Koehler, A., Larsen, H. F., MacLeod, M., & Margni, M. (2008). USEtox—the UNEP-SETAC toxicity model: recommended characterisation factors for human toxicity and freshwater ecotoxicity in life cycle impact assessment. *The International Journal of Life Cycle Assessment*, 13(7), 532-546.

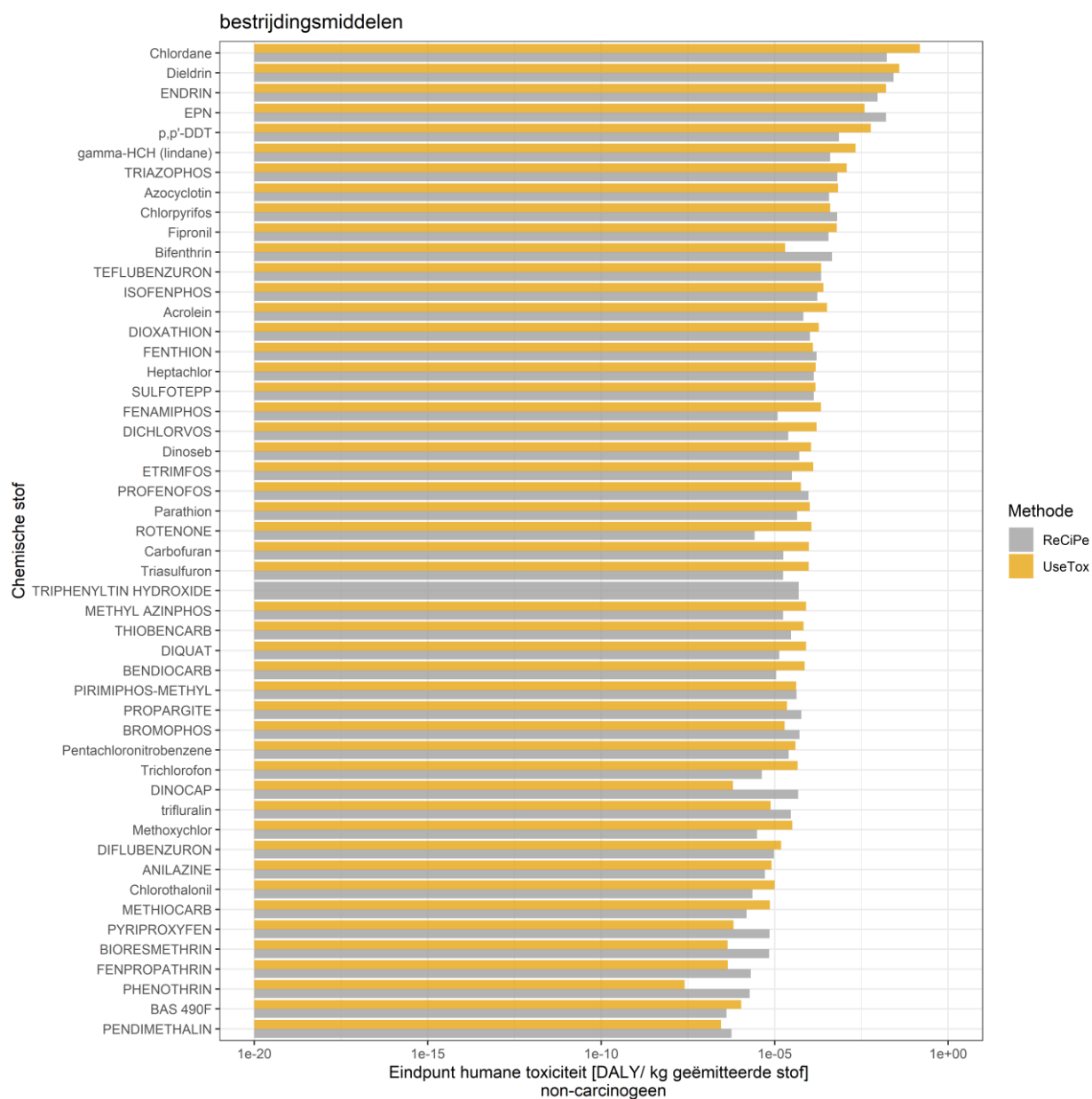
- Rosenbaum, R. K., Hauschild, M. Z., Boulay, A.-M., Fantke, P., Laurent, A., Núñez, M., & Vieira, M. (2018). Life Cycle Impact Assessment. In M. Z. Hauschild, R. K. Rosenbaum, & S. I. Olsen (Eds.), *Life Cycle Assessment: Theory and Practice* (pp. 167-270). Cham: Springer International Publishing.
- Rosenbaum, R. K., Huijbregts, M. A., Henderson, A. D., Margni, M., McKone, T. E., Van De Meent, D., Hauschild, M. Z., Shaked, S., Li, D. S., & Gold, L. S. (2011). USEtox human exposure and toxicity factors for comparative assessment of toxic emissions in life cycle analysis: sensitivity to key chemical properties. *The International Journal of Life Cycle Assessment*, 16(8), 710-727.
- Sala, S., Biganzoli, F., Mengual, E. S., & Saouter, E. (2022). Toxicity impacts in the environmental footprint method: calculation principles. *The International Journal of Life Cycle Assessment*, 27(4), 587-602.
- Struijs, J. (2014). SimpleTreat 4.0: a model to predict fate and emission of chemicals in wastewater treatment plants: Background report describing the equations.
- Sustainability, P. (2020). SimaPro database manual Methods library. *SimaPro: Utrecht, The Netherlands*.
- Thompson, M., Ellis, R., & Wildavsky, A. (1990). *Cultural Theory*, Westview. Press. Boulder, CO.
- U.S. EPA. (2012). *Estimating Physical / Chemical and Environmental Fate Properties with EPI Suite*. Retrieved from
- van der Aa, N., Janssen, P., Verbruggen, E., & Smit, C. (2013). Risicobeoordeling gecombineerde effecten van individuele stoffen in drinkwater: Meetdata Nederlands drinkwater 1996-2008.
- van Zelm, R., Huijbregts, M. A., & van De Meent, D. (2009). USES-LCA 2.0—a global nested multi-media fate, exposure, and effects model: Springer.
- WHO. (2020). *The WHO recommended classification of pesticides by hazard and guidelines to classification 2019*: World Health Organization.
- World Resources Institute, W. B. C. f. S. D. (2004). *The Greenhouse Gas Protocol. A corporate accounting and reporting standard, Rev. ed. Washington, DC, Conches-Geneva*.

I Bijlage: berekende eindpunten in mens en milieu voor individuele bestrijdingsmiddelen, geneesmiddelen en zware metalen.

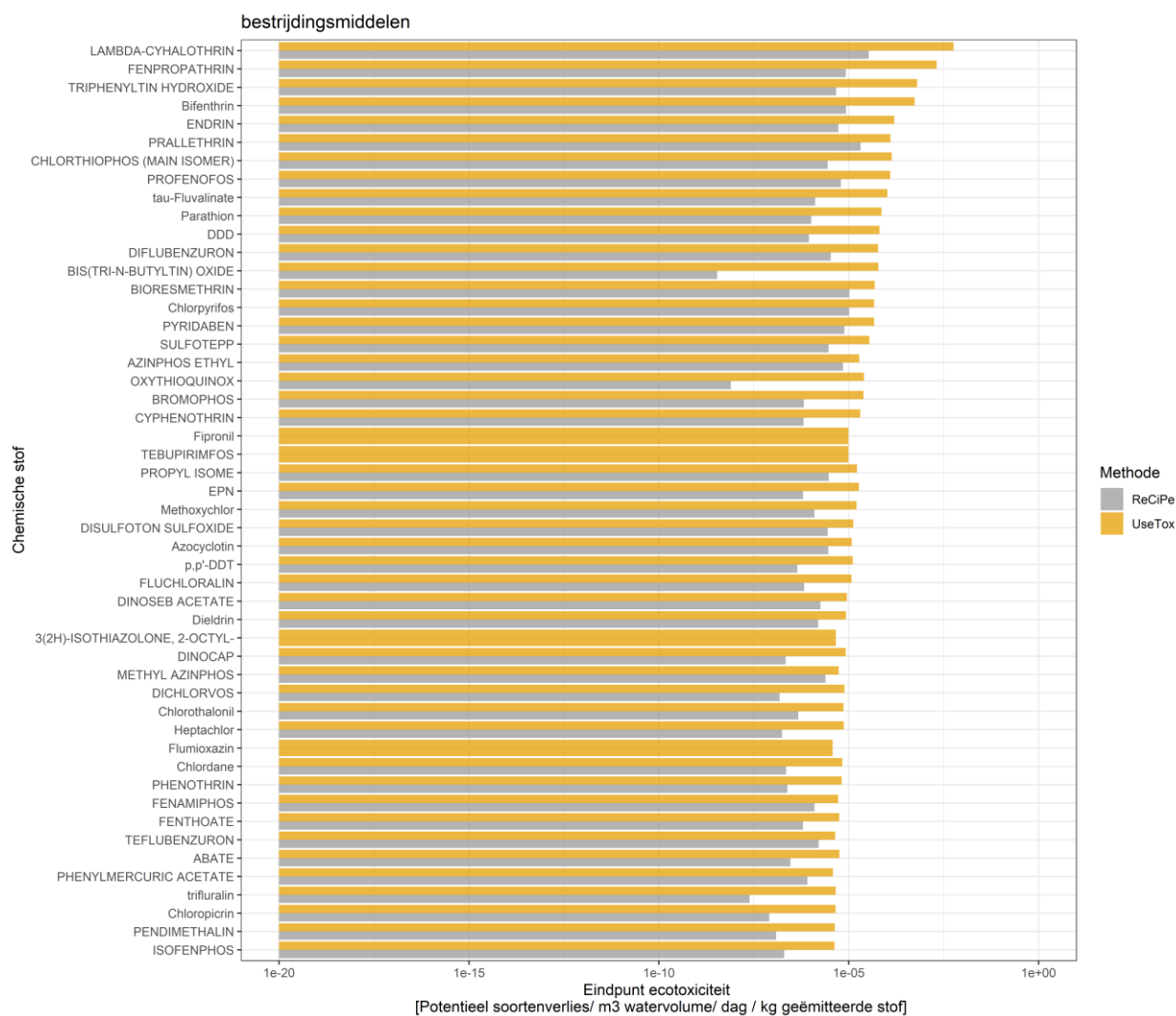
I.1 Bestrijdingsmiddelen:



Figuur S1: Berekende eindpunten m.b.t. carcinogeniteit in de mens (HTP_{eind}) voor bestrijdingsmiddelen, berekend via USEtox en ReCiPe. Voor niet alle stoffen konden beide methodieken worden toegepast (minimum: $1E-16$). In dat geval is maar één balk te zien (Zie hoofdstuk 3). Niet alle stoffen die non-carcinogene effecten hebben, zijn meegenomen in bovenstaande diagram (carcinogene effecten), stoffen met een non-carcinogene effect zijn alleen meegenomen als er ook carcinogene effecten bekend zijn.

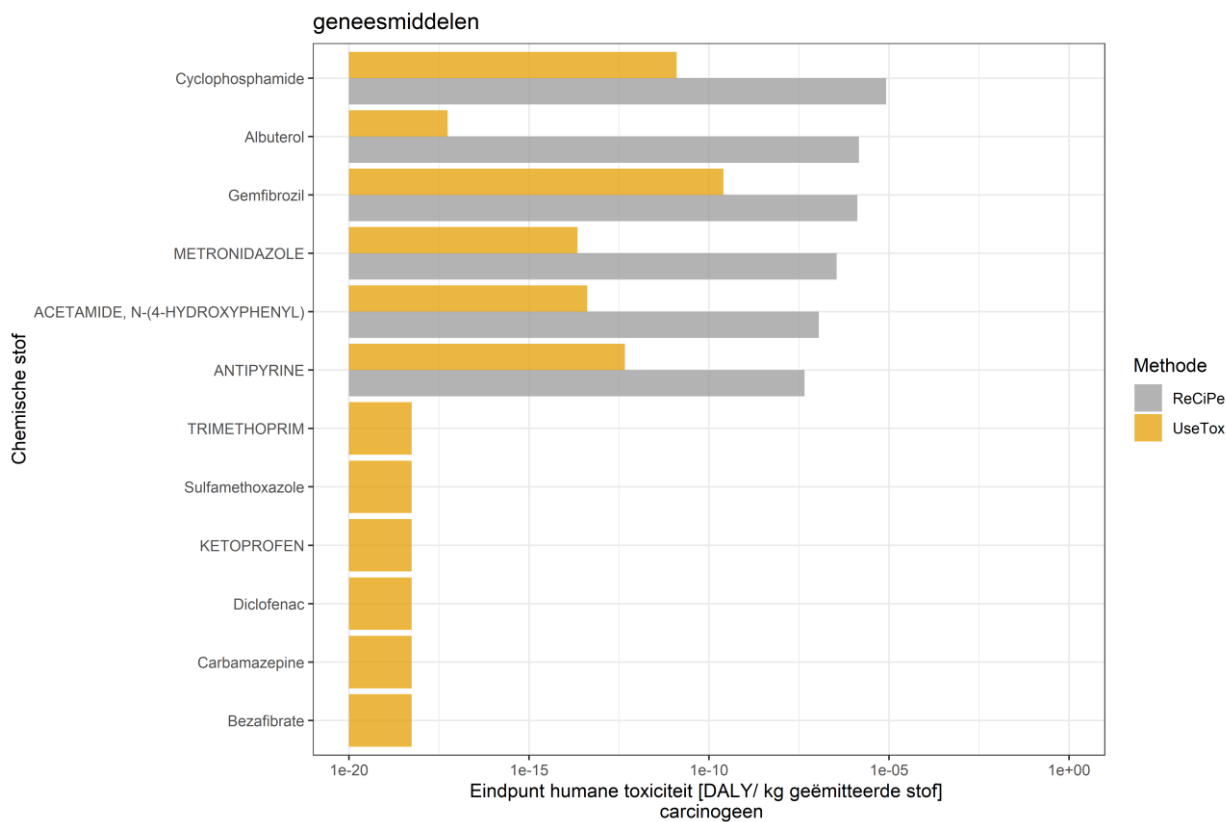


Figuur S2: Berekende eindpunten m.b.t. toxiciteit anders dan carcinogeniteit in de mens (HTP_{eind}) voor bestrijdingsmiddelen, berekend via USEtox en ReCiPe. Voor niet alle stoffen konden beide methodieken worden toegepast. In dat geval is maar één balk te zien (Zie hoofdstuk 3).

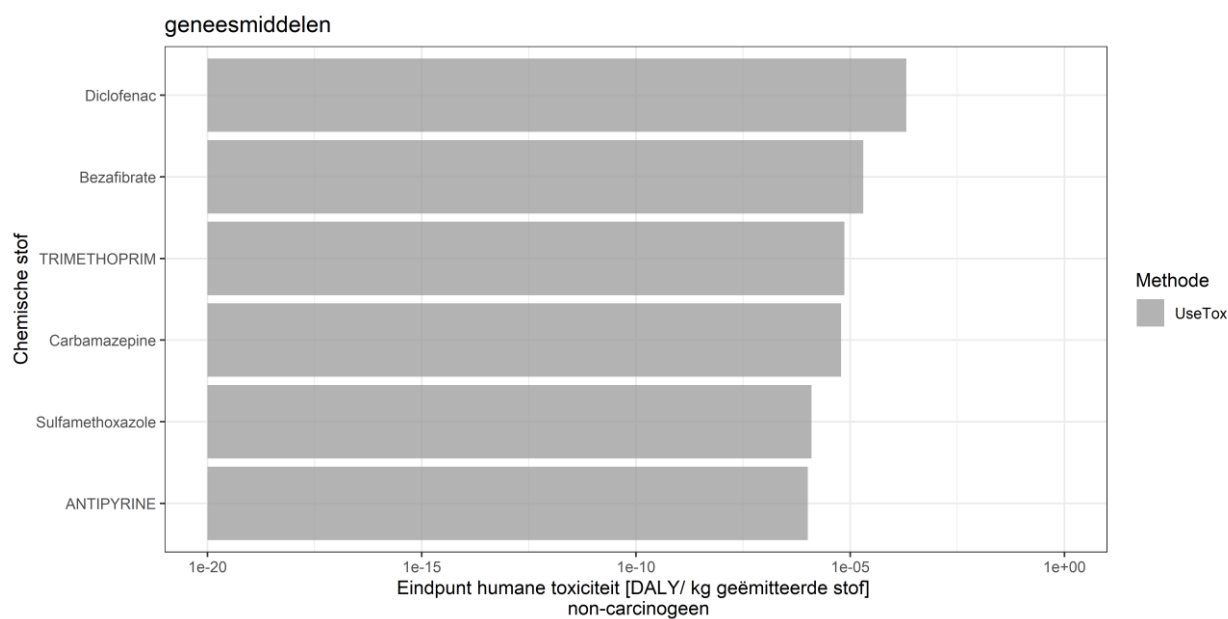


Figuur S3: Berekende eindpunten m.b.t. ecotoxiciteit (ETP_{eind}) voor bestrijdingsmiddelen, berekend via USEtox en ReCiPe. Voor niet alle stoffen konden beide methodieken worden toegepast. In dat geval is maar één balk te zien (Zie hoofdstuk 3).

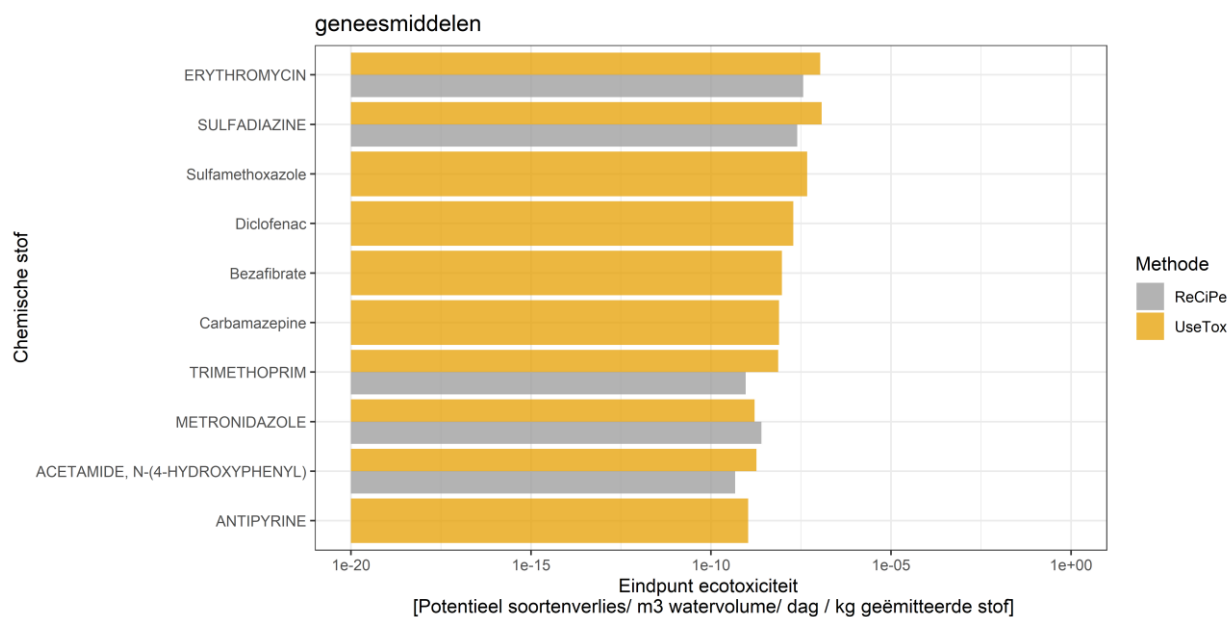
I.II Geneesmiddelen:



Figuur S4: Berekende eindpunten m.b.t. carcinogeniteit in de mens (HTP_{eind}) voor geneesmiddelen, berekend via USEtox en ReCiPe. Voor niet alle stoffen konden beide methodieken worden toegepast. In dat geval is maar één balk te zien (Zie hoofdstuk 3). Niet alle stoffen die non-carcinogene effecten hebben, zijn meegenomen in bovenstaande diagram (carcinogene effecten), stoffen met een non-carcinogene effect zijn alleen meegenomen als er ook carcinogene effecten bekend zijn.

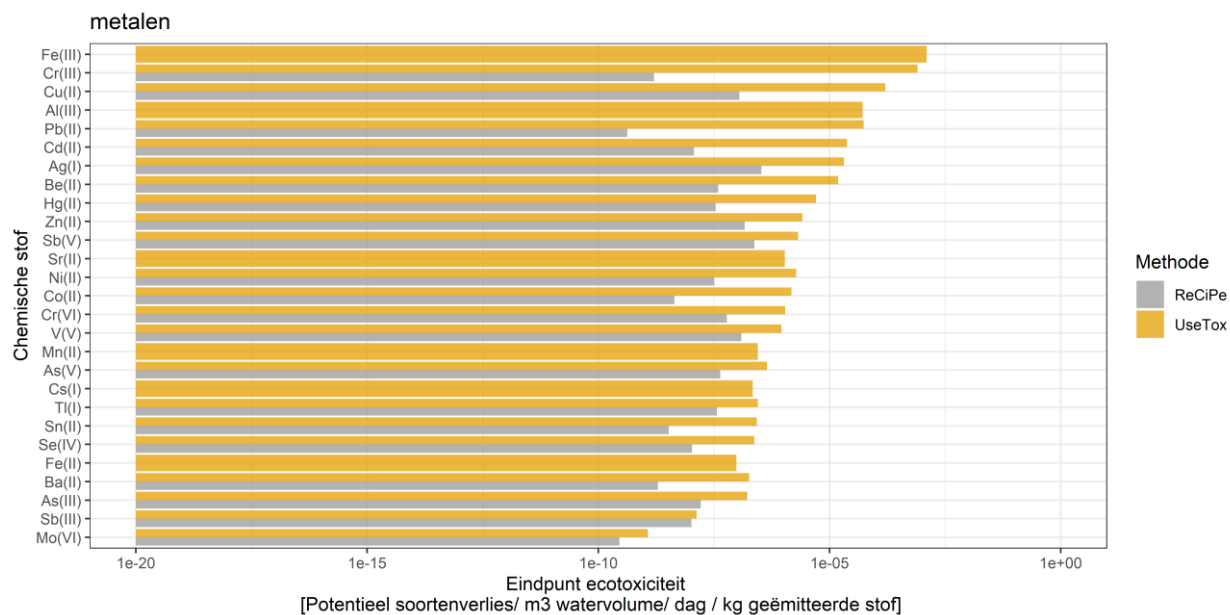


Figuur S5: Berekende eindpunten m.b.t. toxiciteit anders dan carcinogeniteit in de mens (HTP_{eind}) voor geneesmiddelen, berekend via USEtox en ReCiPe. Voor geen van de stoffen konden beide methodieken worden toegepast. In dat geval is maar één balk te zien (Zie hoofdstuk 3).



Figuur S6: Berekende eindpunten m.b.t. ecotoxiciteit (ETP_{eind}) voor geneesmiddelen, berekend via USEtox en ReCiPe. Voor niet alle stoffen konden beide methodieken worden toegepast. In dat geval is maar één balk te zien (Zie hoofdstuk 3).

I.III Metalen:



Figuur S7: Berekende eindpunten m.b.t. ecotoxiciteit (ETP_{eind}) voor zware metalen, berekend via USEtox en ReCiPe. Voor humaan-toxische eindpunten zijn geen eindpunten berekend (Zie hoofdstuk 3.4).

Memo

Tessa van den Brand

Beknopte toelichting technische koppeling van toxiciteit gegevens aan milieustudies

23 september 2021-nieuwe data toegevoegd 5 december 2023.

Bestemd voor

Ondersteunend aan plan van aanpak
verkennd onderzoek
waterkwaliteitfootprinting

Project team

Tessa van den Brand, Astrid Reus, Roberta Hofman-Caris,
Jolijn van Engelenburg en Geertje Pronk
Kwaliteitsborger: Emile Cornelissen

Pagina

51/59

II Memo

Note: memo is nog aangepast op 5 december 2023, om zo de getallen overeen te laten komen met het rapport. Deze update is een gevolg van nieuwe update van de rekenmethodieken en data inventory database.

Introductie

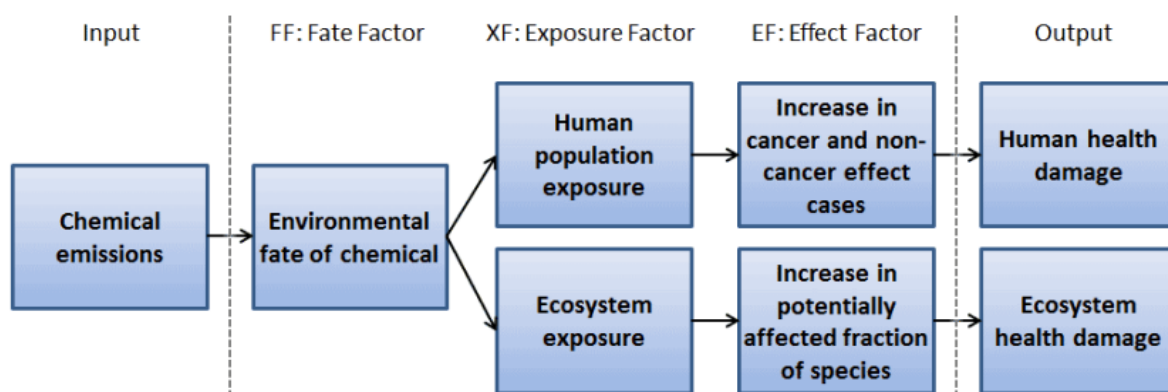
Van vele stoffen die via het water in het milieu terechtkomen is er nauwelijks informatie beschikbaar over de milieu-impact. In milieustudies naar de behandeling van water wordt de kwaliteit van het water daardoor zelden (volledig) meegewogen. De duurzaamheid van een technologie wordt daarom doorgaans enkel getoetst aan de hand van infrastructuur en het energie- en chemicaliënverbruik, terwijl de milieuwinst van verbeterde waterkwaliteit niet meegenomen kan worden. Toch draagt het water wel degelijk bij door de uitstoot c.q. aanwezigheid van een groot aantal verschillende stoffen (met onbekende milieu-impact). Voor stikstof en fosfaat is het in enkele milieustudies al wel mogelijk om de milieu-impact te bepalen, maar voor medicijnen en zeer zorgwerkkende stoffen (ZZS) is dit (nog) niet het geval. In dit voortraject van het verkennd onderzoek wilden we verkennen welke mogelijkheden er zijn om de waterkwaliteit wél mee te nemen in een milieustudie en aantonen wat het belang hiervan is voor milieu-impactstudies.

Milieustudies kunnen op verschillende manieren worden berekend of uitgedrukt. Enkele voorbeelden hiervan zijn CO₂ footprint (CO₂-eq), waterfootprint (m³), effect op biodiversiteit (PDF in species.year), humane toxicologie (DALY) etc.. Elke methodiek wordt uitgedrukt in een specifieke eenheid. Voor elk van deze methoden geldt dat er een 'vertaling' nodig is om de verwachte milieu impact van een stof in deze specifieke eenheid uit te kunnen drukken. In dit onderzoek hebben we ons voor nu gericht op de Recipe methode, een methodiek die vaak wordt gebruikt om scenario's te vergelijken in de watersector. Bovendien rekent deze methode met verschillende milieu-impact categorieën, waardoor ervaring met verschillende andere categorieën, zoals de toxiciteit voor de mens en

ecosystemen, meeweegt. Dit heeft als voordeel dat er ervaring opgedaan kan worden met verschillende typen milieu impact (biodiversiteit en humane toxicologie bijvoorbeeld).

Toxiciteit in kaart brengen

Om de milieu-impact te bepalen is het belangrijk om de 'route' van impact te bepalen. In het geval van waterkwaliteit, emissie van stoffen naar water, zit de impactroute op blootstelling aan een stof (consumptie, inhalatie en/of contact). Dit kan dus zowel leiden tot een humane toxiciteit als tot een ecotoxiciteit. Beide impact categorieën kunnen door de volgende versimpelde beschrijving weergegeven worden (Figuur 8).



Figuur 8 oorzaak-en-effect keten: van emissie tot schade van ecosysteem en menselijke gezondheid. Onder deze figuur staat de benaming van de factoren die in de verschillende stappen een rol spelen (foto uit: Verones et al., 2020).

Elke stap in de oorzaak-en-effectketen wordt vertegenwoordigd door een factor: Fate (FF), eXposure (XF), Effect (EF) en Damage (DF) factoren. Deze factoren samen bepalen de karakterisatiefactor (CF) van chemicaliën in een compartiment (in dit geval water). Een karakterisatiefactor kan kortweg worden samengevat als de toxiciteit van 1 kg geëmitteerde stof, waarin rekening is gehouden met het verval in het milieu (fate), mate van blootstelling (exposure), het verwachte effect (effect) en schade (damage).

Dit kan in de volgende formule worden beschreven.

$$CF = FF * XF * EF * DF = IF * EF * DF$$

Waarbij de intake factor $IF = FF * XF$

Voor de Effect en Damage factoren zijn momenteel wetenschappelijke uitgangspunten beschikbaar voor zowel toxiciteit voor de mens als het ecosysteem (Huijbregts et al., 2005). Deze uitgangspunten zijn onafhankelijk van de stof. Denk hierbij bijvoorbeeld aan hoeveel levensjaren die verloren gaan bij ziekte (als gevolg van blootstelling aan een bepaalde stof). De Intake factor, een combinatie van Fate en eXposure factor is wél specifiek voor een stof. Deze factoren worden namelijk bepaald door eigenschappen van het molecuul. Voorbeelden hiervan zijn het molecuulgewicht, pKa, diffusie coëfficiënten etc. Deze kunnen met verschillende modellen voorspeld worden, bijvoorbeeld met QSARs, en vervolgens kan met Usetox de intake factor worden geschat (Fankte et al., 2021).

Om medicijnen(resten) in het effluent mee te kunnen wegen in milieustudies moeten er twee stappen gezet worden:

1. Een vertaling van alle molecuuleigenschappen naar een Intake factor. Hiervoor kan het USETOX model gebruikt worden. Verder verdieping in het USETox model is dan noodzakelijk.
2. De voorspelling van molecuuleigenschappen en hun 'fate' in het milieu van onbekende stoffen. Wanneer er maar beperkte informatie beschikbaar is van een molecuul kunnen met behulp van QSARs deze eigenschappen voorspeld worden.

Berekening milieu-impact

De eco en humane toxiciteit kan berekend worden met het USETOX model. Met dit model zijn de karakterisatiefactoren van twee voorbeeld medicijnen (trimethoprim en sulfamethoxozole) bepaald, zie tabel 1.

Tabel 6 Toxiciteitgegevens voor de geselecteerde medicijnen (informatie uit Nyberg et al., 2021)

	Humane Toxiciteit (cases/kg emitted)	Ecotoxiciteit (PAF m ³ /kg emitted)
trimethoprim	$5,66 \cdot 10^{-7}$	$9,87 \cdot 10^5$
sulfamethoxozole	$4,70 \cdot 10^{-7}$	$1,00 \cdot 10^5$

De humane toxiciteit kan vervolgens omgerekend worden naar DALY door te vermenigvuldigen met de damage factor (DALY/case); deze is vastgesteld op 2,7 en 11,5 voor respectievelijk niet of wel kanker gerelateerde ziekten (Huijbregts et al., 2005). Het omrekenen van DALY naar ecopunten kan dan met de volgende factor: $1,69 \cdot 10^7$ mPt/DALY (Goedkoop et al., 2013).

Voor ecotoxiciteit gaat een vergelijkbare methodiek op. Hier kan de karakterisatiefactor bepaald worden door de PDF (species.yr) waarde van een compartiment (bijvoorbeeld zoetwater) te vermenigvuldigen met species dichtheid van hetzelfde compartiment. PAF kan omgerekend worden naar PDF volgens de volgende formule uit Joliet et al., 2003: $PDF = 0,5 \text{ PAF}$. De dichtheid van species in zoetwater is door goedkoop et al., 2013 vastgesteld op $7,89 \cdot 10^{-10}$ (1/m³). Dit is het aantal verschillende soorten species die er bestaan (dus van elk soort één) in het volume van het compartiment. Het omrekenen van PDF naar ecopunten kan dan met de volgende factor: $5,58 \cdot 10^8$ mPt/PDF (Goedkoop et al., 2013).

Toegepast in een casus

Ter toetsing of de uitkomsten van USETOX gekoppeld kunnen worden aan een LCA berekening én of de mogelijkheid om waterkwaliteit mee te nemen relevant is, is een voorbeeldstudie uitgevoerd.

Er is een milieu-impact studie uitgevoerd voor het behandelen van 1m³ afvalwater in de RWZI AmsterdamWest (de impact van infrastructuur is buiten beschouwing gelaten, omdat die doorgaans verwaarloosbaar is). De gegevens voor waterkwaliteit, broeikasgasemissies, energie en chemicaliënverbruik zijn afkomstig uit het technisch

jaarverslag Waternet 2013. De enige effluent parameters die tot op heden meegenomen konden worden zijn stikstof- en fosfaatemissie. De milieu-impact van de RWZI Amsterdam-West is $4.55 \cdot 10^{-7}$ DALY (humane toxiciteit) en $8.93 \cdot 10^{-10}$ species.year (eco toxiciteit). Soms is het gewenst de milieu-impact in één eenheid uit te drukken: daar kunnen bijvoorbeeld ecopunten voor worden gebruikt (en dan neemt het model o.a. eco en humane toxiciteit mee). In dat geval is de milieu-impact $7,94 \cdot 10^{-3}$ Pt per m³ behandeld afvalwater. Waarbij 1.000 Pt is vastgesteld als de gemiddelde impact van een Wester-Europees persoon per jaar (Baayen et al., 2000). Deze berekening is uitgevoerd met SimaPro 9.4.0.2, Recipe 2016 V1.08 Endpoint (H) en EcoInvent database 3.8.

Vervolgens hebben we de milieu-impact van twee medicijnen mee gewogen in de totale milieu-impact van een afvalwaterzuivering: het gaat om trimethoprim en sulfamethoxazole. In werkelijkheid zijn er veel meer stoffen die via het water geëmitteerd worden, die niet worden meegenomen in het bepalen van de milieu-impact. Voor nu houden we het simpel, om alleen de technische mogelijkheid en het belang van waterkwaliteitsfootprint in kaart te brengen. In eerder onderzoek zijn voor verscheidene antibiotica karakterisatiefactoren berekend met behulp van het UESTOX model (Nyberg et al., 2021). Voor beide antibiotica, trimethoprim en sulfamethoxazole, is ook een (gemiddelde) concentratie in het RWZI effluent beschikbaar (Hofman-Caris et al., 2019 en Hofman-Caris et al. 2017). Wanneer we deze twee antibiotica ook meenemen in de milieu impact bepaling voor Amsterdam-West, wordt een milieu-impact bepaald $4,55 \cdot 10^{-7}$ DALY en $1,03 \cdot 10^{-9}$ species.year (in vergelijking met $4,55 \cdot 10^{-7}$ DALY en $8,93 \cdot 10^{-10}$ species.year, wanneer wel het effluent, maar niet de twee antibiotica worden meegenomen). In ecopunten wordt het totaal dan $7,944 \cdot 10^{-3}$ Pt per m³ behandeld afvalwater. Dit betekent dat de totale milieu-impact impact door enkel en alleen al het effect van lage concentraties van deze twee antibiotica mee te nemen respectievelijk 11 en 0,03% toeneemt voor ecotoxiciteit (species.year) en ecopunten (mPt). Het effect op humane toxiciteit is verwaarloosbaar klein, maar aangezien de medicijnen specifiek ontworpen zijn voor de mens is dat conform verwachting. Dit hoeft niet zo te zijn als we ook effecten van microplastics en andere Zeer Zorgwekkende Stoffen (ZZS) meewegen.

Betekenis

Deze berekening illustreert dat het meenemen van enkel twee medicijnen al tot een behoorlijke toename van de totale milieu-impact leidt. Dit zou ervoor pleiten niet langer alleen beleid te voeren t.b.v. klimaatneutraliteit op reductie van energie en chemicaliënverbruik, maar ook de waterkwaliteitsfootprint hierin mee te nemen. Het is daarbij belangrijk de stakeholder zorgvuldig mee te nemen in deze paradigma shift, maar ook handvatten te bieden om dit in te bouwen in besluitvorming. Enkele ideeën hiertoe zijn opgenomen in het plan van aanpak.

Dit is toegevoegd in juli t/m september 2022

Er is echter veel verschil in verschillende rekenmethodieken.

Momenteel zijn er drie methodieken getoetst: Recipe, Environmental footprint 3.0 en usetox. Hierbij is uitgegaan van een effluent kwaliteit zoals aangegeven in Tabel 7 effluent kwaliteit per m³ Tabel 7. Ook zijn de sliblijn en waterlijn gemodelleerd (met de gegevens van RWZI Amsterdam-West in 2012).

Tabel 7 effluent kwaliteit per m³

nutrienten					
------------	--	--	--	--	--

CZV	kg/jaar	2192359		34,25217	g/m ³
BZV	kg/jaar	182813		2,856166	g/m ³
N-K	kg/jaar	241274		3,769528	g/m ³
N-tot	kg/jaar	469378		7,333294	g/m ³
P-tot	kg/jaar	42042		0,65684	g/m ³
zware metalen					
arseen	kg/jaar	72,6		0,001134	g/m ³
cadmium	kg/jaar	5		7,81E-05	g/m ³
chromium	kg/jaar	21,5		0,000336	g/m ³
koper	kg/jaar	383,8		0,005996	g/m ³
kwik	kg/jaar	0,1		1,56E-06	g/m ³
lood	kg/jaar	26,6		0,000416	g/m ³
nikkel	kg/jaar	106,1		0,001658	g/m ³
zink	kg/jaar	2206,3		0,03447	g/m ³
medicijnen					
trimethoprim				1,12E-07	kg/m ³
sulfamethoxazole				1,78E-07	kg/m ³

Dit model is nagebouwd in simapro software, die gelinkt staat aan de Ecolnvent database (3.8) en verschillende rekenmethodieken. Zodoende kon getest worden, voor verschillende methodieken, wat het aandeel in percentage was van zware metalen, nutriënten (COD, N en P) en medicijnen (trimethoprim en sulfamethoxazole). Niet verschilden de absolute getallen (die kun je sowieso niet met elkaar vergelijken door andere normalisatie en wegings-factoren), maar vooral ook het aandeel in percentage van de medicijnen op het totaal. Deze gegevens zijn samengevat in Tabel 8.

Tabel 8 De damage waarden voor medicijnen, nutriënten en zware metalen voor verschillende rekenmethodieken. Waarden zijn in percentages t.o.v. RWZI totaal (sliblijn en waterlijn van RWZI Amsterdam-West). Dit zijn getallen vóór de update van aug 2022.

	Recipe endpoint E	EF 3,0	usetox	usetox
effect (%)			Human health	eco
medicijn - sulfamethoxazole	0	0,00367	0	0
medicijn - trimethoprim	2,93E-07	0,000561	0	0
nutriënten	1,85	43,4	0	0
zware metalen	15,5	1,97	16,8	0,529

De onderstaande waarden zijn afkomstig uit eerder onderzoek gebaseerd op een USETOX waarde (Nyberg et al 2021).

Sulfametoxazole $1 \cdot 10^5$ PAF $\cdot$ m³ $\cdot$ dag/kg

Trimethoprim $9,87 \cdot 10^5$ PAF $\cdot$ m³ $\cdot$ dag/kg

Wanneer we dit in simapro software doorrekenen met usetox (versie 2.12) krijgen we de volgende waarden

	Usetox Freshwater toxicity (PAF $\cdot$ m ³ $\cdot$ day)	usetox Human toxicity non cancer (cases)	Nyberg et al 2021 Freshwater toxicity (PAF $\cdot$ m ³ $\cdot$ day)	Nyberg et al 2021 Human toxicity non cancer (cases)
Sulfametoxazole	$4,7 \cdot 10^3$	$4,7 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^5$	$4,7 \cdot 10^{-7}$
trimethoprim	995	$2,78 \cdot 10^{-6}$	$9,87 \cdot 10^5$	$5,66 \cdot 10^{-7}$

Compartimenten effect

Uit de karakterisatie waarden voor sulfamethoxazole en trimethoprim blijkt dat er verschillende waarden voor verschillende compartimenten zijn (in dit voorbeeld oceaan, rivier en bodem). Er is nog verder onderscheid mogelijk. De significantie daarvan hangt af van welke methode gekozen wordt en hoe betrouwbaar deze geacht wordt.

	sulfamethoxazole			trimethoprim		
	Usetox	EF 3.0	Recipe	Usetox	EF 3.0	Recipe
compartiment	PAF.m ³ .d	CTUe	kg 1,4-DCB	PAF.m ³ .d	CTUe	kg 1,4-DCE
oceaan	1,90E-04	8,05E-05	x	1,09E-06	5,09E-07	2,87E-09
river	4,70E+03	1,57E+04	x	9,95E+02	3,32E+03	1,32E+00
soil	1212	4041,1	x	13,15	86,45	0,226

Voor Recipe kennen veel stoffen nog geen impact. Vaak wel in het compartiment rivier, maar niet in grondwater bijvoorbeeld. Dit komt doordat deze informatie nog niet is toegevoegd, of omdat het nog niet bekend is. Ook voor de bodem ontbreken er nog veel data.

Voor de stoffen waarvoor wel data beschikbaar zijn, is er door compartiment verandering vaak een verschil in effect te zien.

Koppeling aan CO₂

Veel bedrijven en instanties werken met de CO₂-voetafdruk, zo ook in de watersector. Drinkwaterbedrijven werken aan klimaatneutraliteit door de emissies in scope 1 in CO₂ voetafdruk te bepalen. Wanneer we nu de waterkwaliteit

mee zouden willen nemen, kán het handig zijn om aan te sluiten in dezelfde systematiek. Dit is niet helemaal correct, omdat bij de emissie van een medicijn naar water, geen CO₂ vrijkomt. Echter is dit een wél een mogelijkheid om de ernst van de emissie mee te nemen.

Uit de rekenmethodiek van RIVM (Recipe) kunnen de volgende omrekenfactoren gefilterd worden: $2,80 \cdot 10^{-9}$ species.year/kg CO₂ en $9,28 \cdot 10^{-7}$ DALY/kg CO₂. Met de toxiciteit gegevens van trimethoprim en sulfamethoxazole kan worden vastgesteld wat de fictieve CO₂ uitstoot voor effect heeft. De totale CO₂ voetafdruk van RWZI is 0,214 kg CO₂/m³, en wanneer deze twee medicijnen worden meegewogen wordt dit 0,23 kg CO₂/m³, dit komt neer op een toename van ~8,4%.

Welke vragen heb ik nu

- Hoe betrouwbaar zijn de resultaten als literatuur zo verschilt van het software model versie 2.12. Komen wij op dezelfde getallen uit? En is het fout van Nyberg? Of is er een update van impact gegevens?
- Ook met de vaste gegevens veel verschillen tussen recipe, ef3.0 en usetox? Hoe is dit uitwisselbaar? Welke is betrouwbaarder? Welke conclusie kunnen we trekken uit significantie? Hebben we het nu over iets belangrijks (effect effluent kwaliteit) of niet?
- Kunnen we gegevens onderling tussen deze rekenmethodieken uitwisselen? Zoals COD, N en medicijnen? Want COD en N en P hebben in usetox (volgens versie 2.12) dan weer geen effect
- Kunnen we CO₂ met een truc=omrekenen? Omdat alles in CO₂ wordt uitgedrukt? Zie ook excel file
- Kunnen we usetox als model gebruiken voor vaststellen karakterisatie waarden, en deze inbouwen in recipe.

Vragen voor de stuurgroep

- Is het nu rijp genoeg om zelfstandig door te gaan, of is nog een duwtje in de rug nodig?
- Hoe kunnen we dit bij beleidsmakers grijpbaar maken, zodat ze er iets mee kunnen.

Literatuur

Baayen, H. (2000). Eco-indicator 99; manual for designers; A damage oriented method for Life Cycle Impact Assessment, Ministry of Housing, Spatial Planning and the Environment, The Hague, The Netherlands

Fantke P., W.A. Chiu, L. Aylward, R. Judson, L. Huang, S. Jang, T. Gouin, L. Rhomberg, N. Aurisano, T. McKone, O. Joilliet (2021). "Exposure and toxicity characterization of chemical emissions and chemicals in products: global recommendation and implementation in USEtox". The international journal of life cycle assessment.

Goedkoop, M., R. heijungs, M. Huijbregts, A. de Schryver, J. Struijs and R. van Zelm (2013). "Recipe 2008: a life cycle impact assessment method which comprises harmonized category indicators at the midpoint and the endpoint level: .

Hofman-Caris, C. H. M., W. G. Siegers, K. van de Merlen, A. W. A. de Man and J. A. M. H. Hofman (2017). "Removal of pharmaceuticals from WWTP effluent: Removal of EfOM followed by advanced oxidation." Chemical Engineering Journal **327**: 514-521.

Hofman-Caris, R., T. ter Laak, H. Huiting, H. Tolkamp, A. de Man, P. van Diepenbeek and J. Hofman (2019). "Origin, fate and control of pharmaceuticals in the urban water cycle: A case study." Water (Switzerland) **11**(5).

Huijbregts, M.A.J., L.J.A. Rombouts, A.M.J. Ragas, D. van de Meent (2005). "Human-toxicological effect and damage factors of carcinogenic and noncarcinogenic chemicals for life cycle impact assessment". Integrated environmental assessment and management volume 1, number 3 pp 181-244.

Jolliet O., M. Margni et al., (2003). Int. J. Life Cycle Assess 8(6): 324-330.

Nyberg, O., A. Rico, J.B. Guinée, P.J.G. Henriksson (2021). "Characterizing antibiotics in LCA-a review of current practices and proposed novel approaches for including resistance". The international journal of life cycle assessment.

Verones, F., M.A.J. Huijbregts, L.B. Azevedo, A. Chaudhary, N. Cosme, L. de baan, P. Fantke, M. Hauschild, A.D. Henderson, O. Jolliet, C.L. Mutel, M. Owsianiak, S. Pfister, P. Preiss, P-O Roy, L. Scherer, Z. Steinmann, R. van Zelm, R. van Dingenen, T. van Goethem, M. Vieira, S. Hellweg (2020). "LC-IMPAT version 1.0, a spatially differentiated life cycle impact assessment approach. [LC-IMPACT Overall report 20201113.pdf](#)

Waternet (2013). "Technisch jaarverslag 2012". Eindredactie: