



11 juni 2024

~

# Concentratiedynamiek in oppervlaktewateren

Tessa Pronk



# KWR Water Research Institute



WHO Collaborating Centre on  
Water Quality and Health

**KWR**

- Onderzoeksinstituut van 10 Nederlandse en een Vlaams drinkwaterbedrijf – onderzoek voor de gehele watercyclus
- Institutioneel geheugen voor de watersector: 40 jaar collectief onderzoek van bron tot kraan



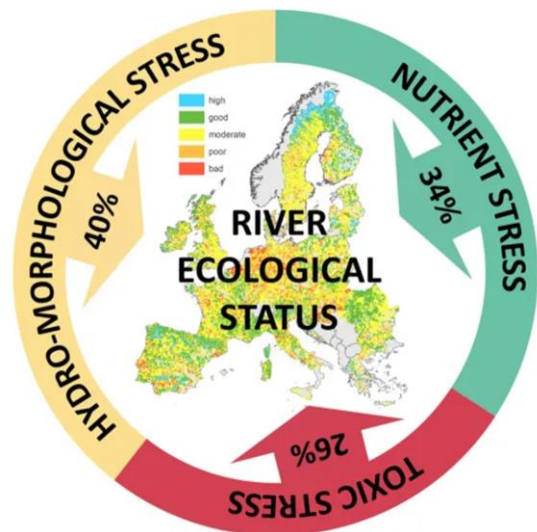
## Team Chemische waterkwaliteit en gezondheid

- Analytische Chemie (uitgebreid Chemisch laboratorium)
- 'Environmental Forensics'
- Toxicologische risicobeoordeling

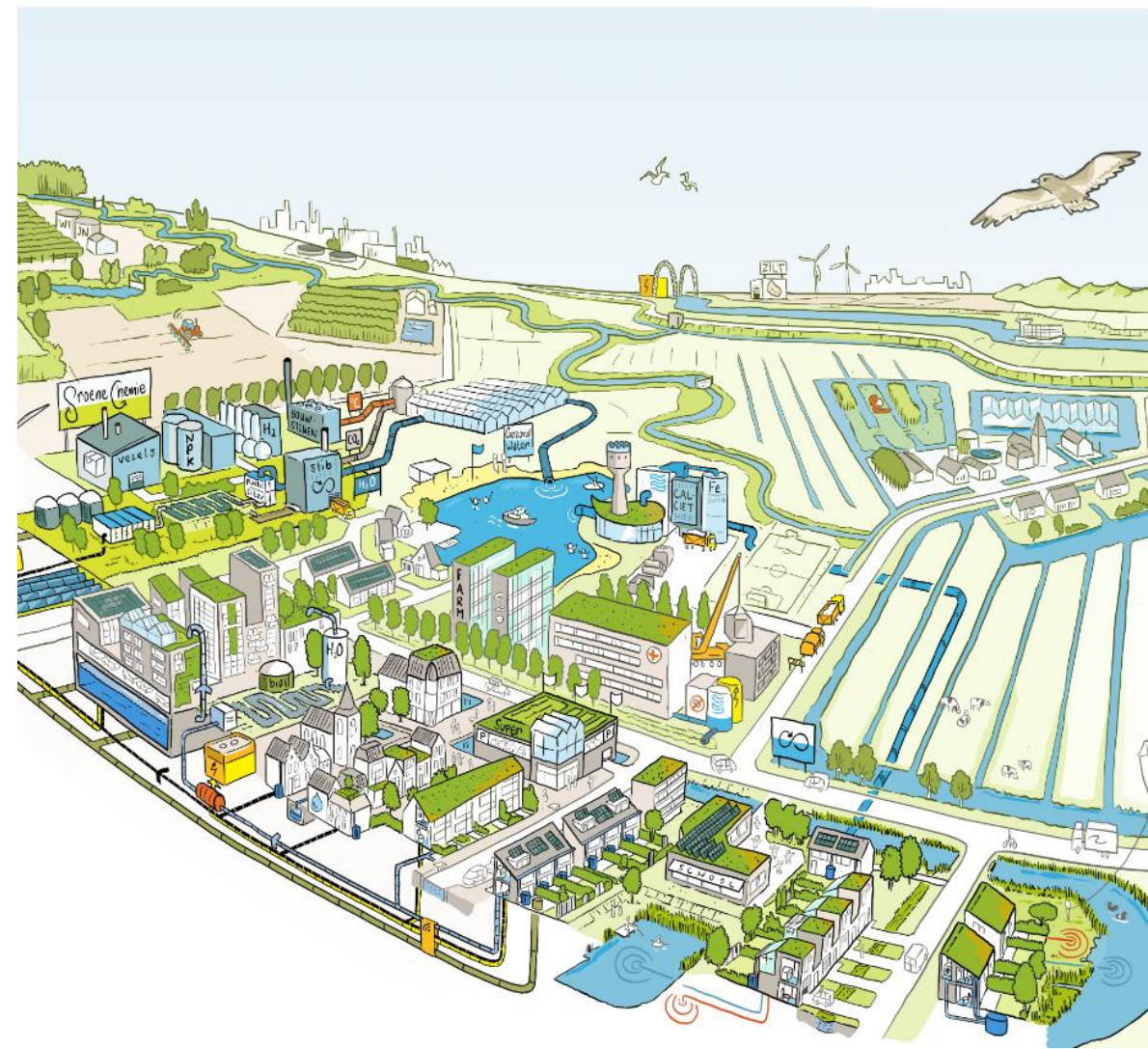


+/-200 medewerkers  
+/- 140 onderzoekers

# Chemische verontreiniging: niet te onderschatten

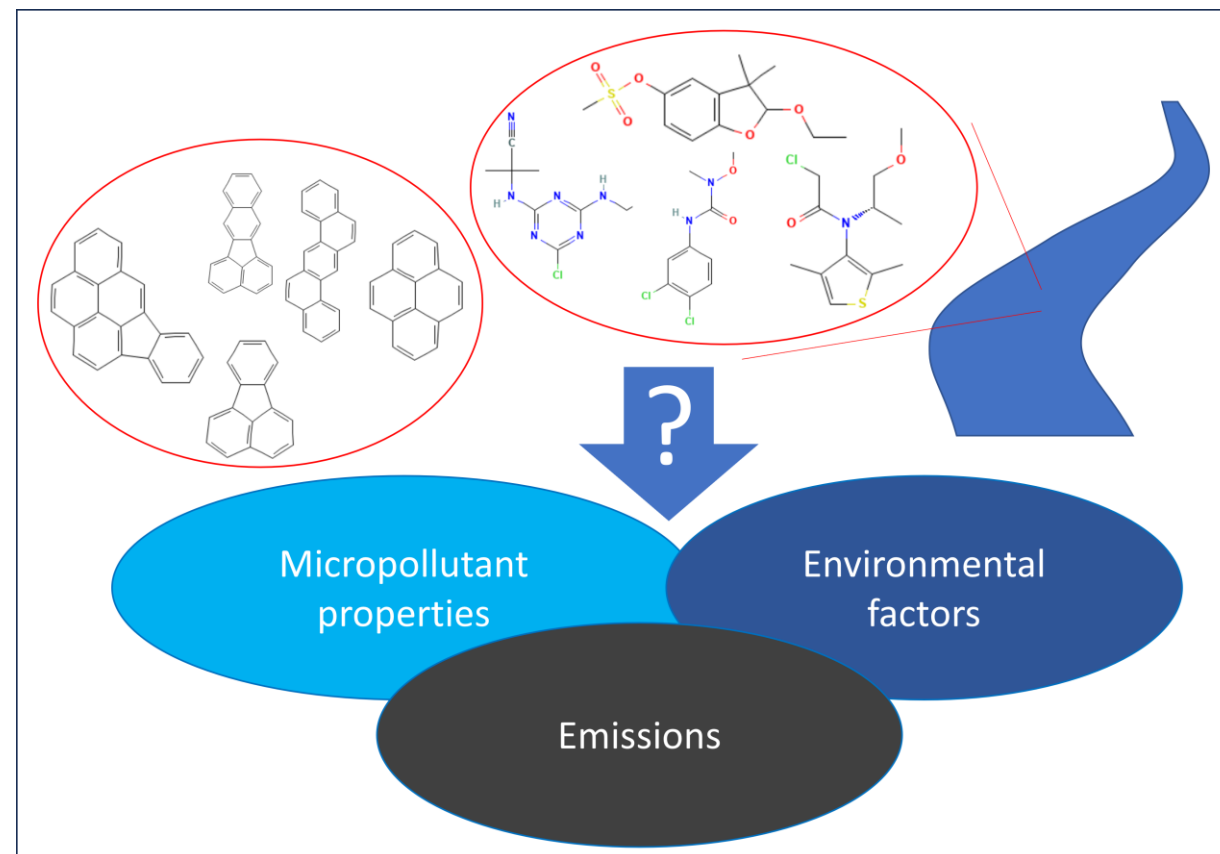
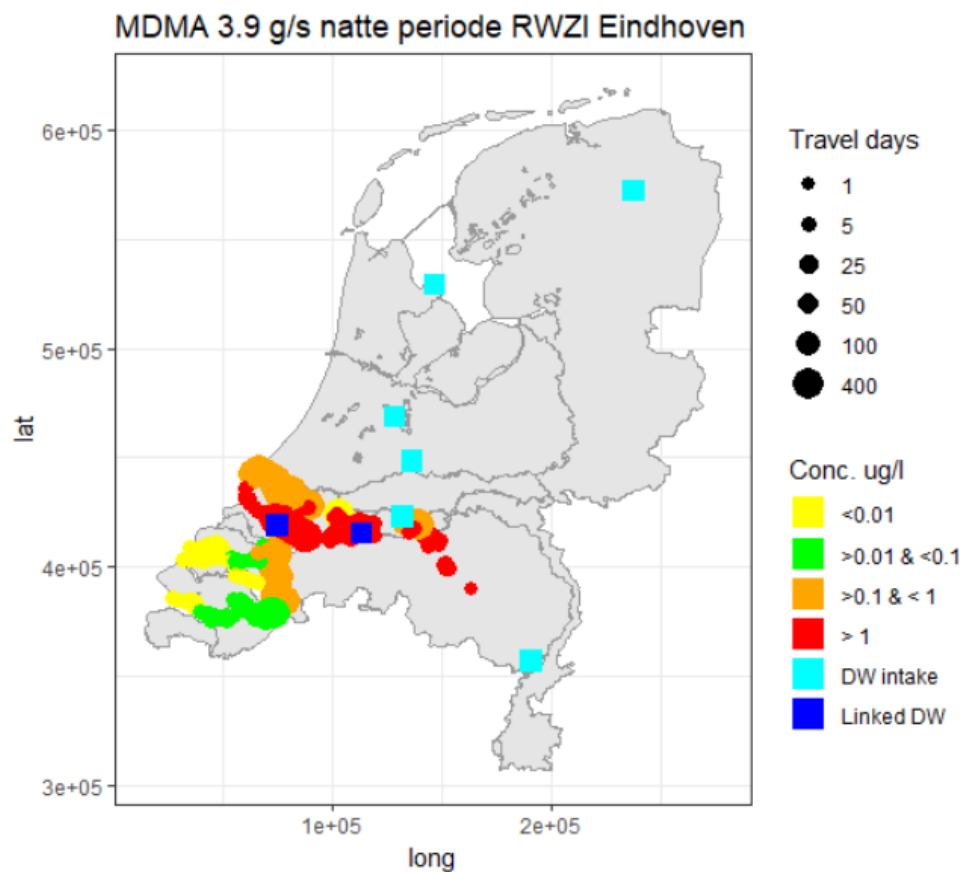


Maaswater vervuild met landbouwgif, inname drinkwater gestaakt



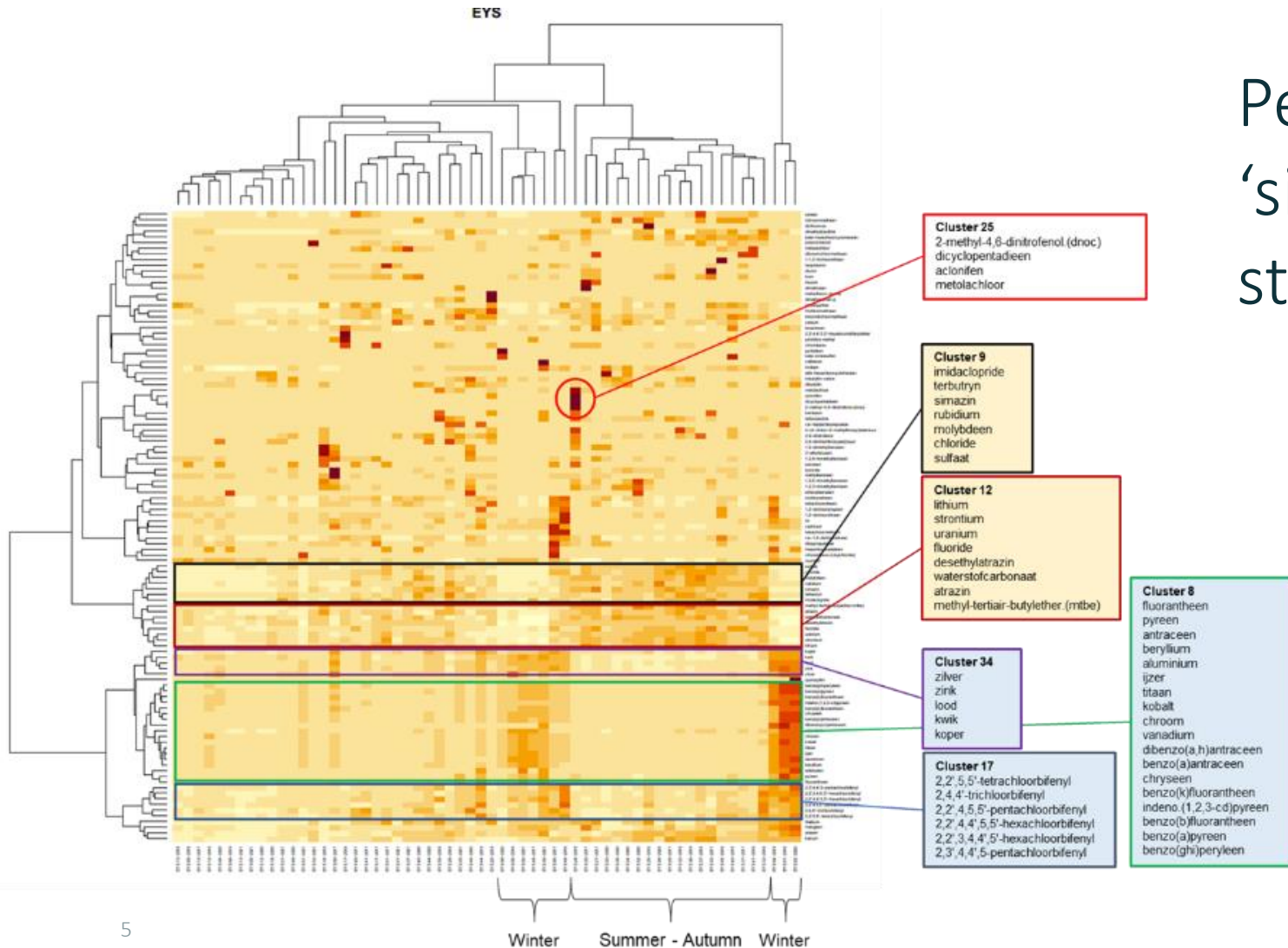
# Meetprogramma's meten stofconcentraties

Zijn concentraties in oppervlaktewater te verklaren?

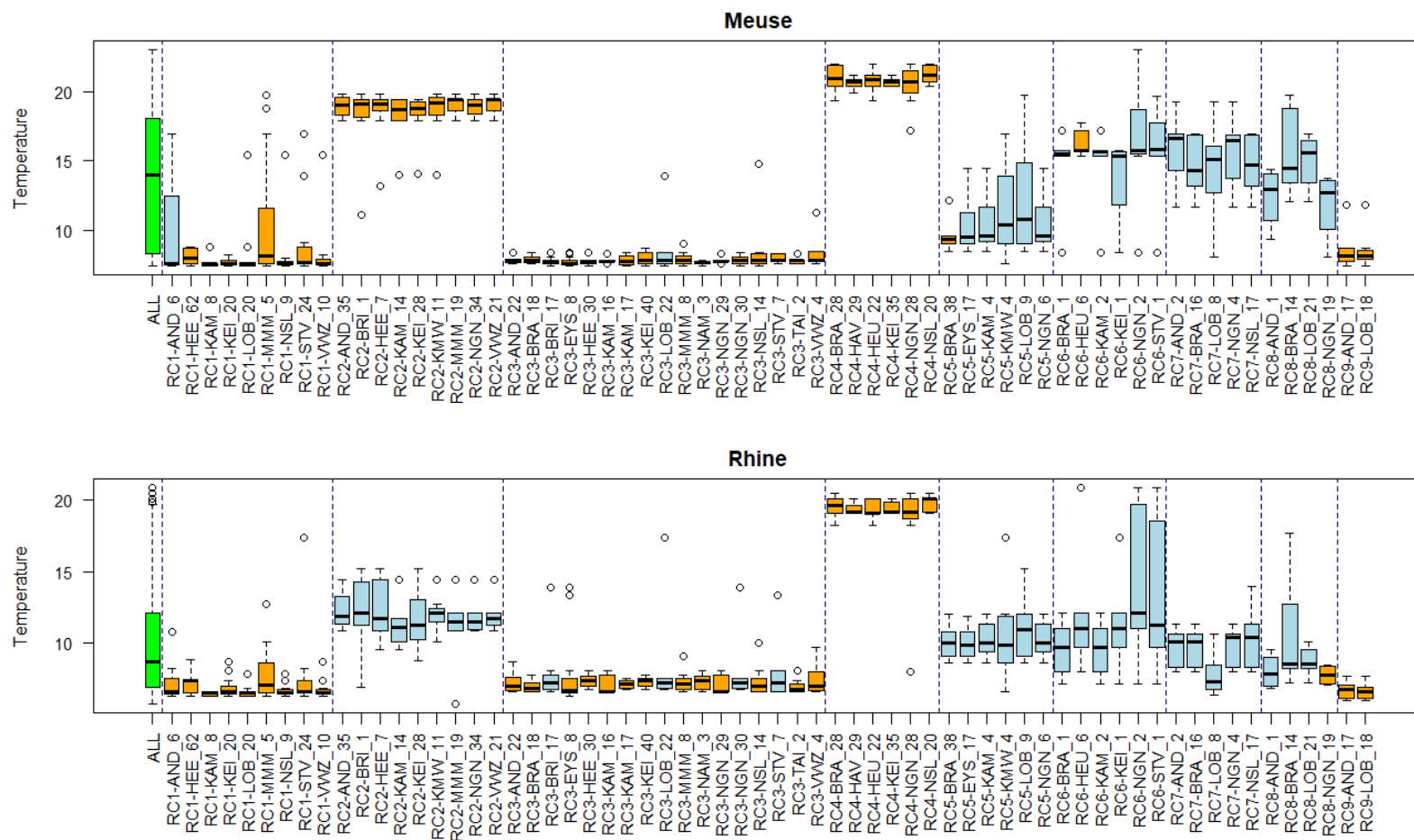


# Concentraties van stoffen correleren

Per meetlocatie Rijn en Maas:  
 'significante' clusters van  
 stoffen



- Stoffen in clusters hebben specifieke chemische eigenschappen
- Clusters zijn geassocieerd met specifieke omstandigheden

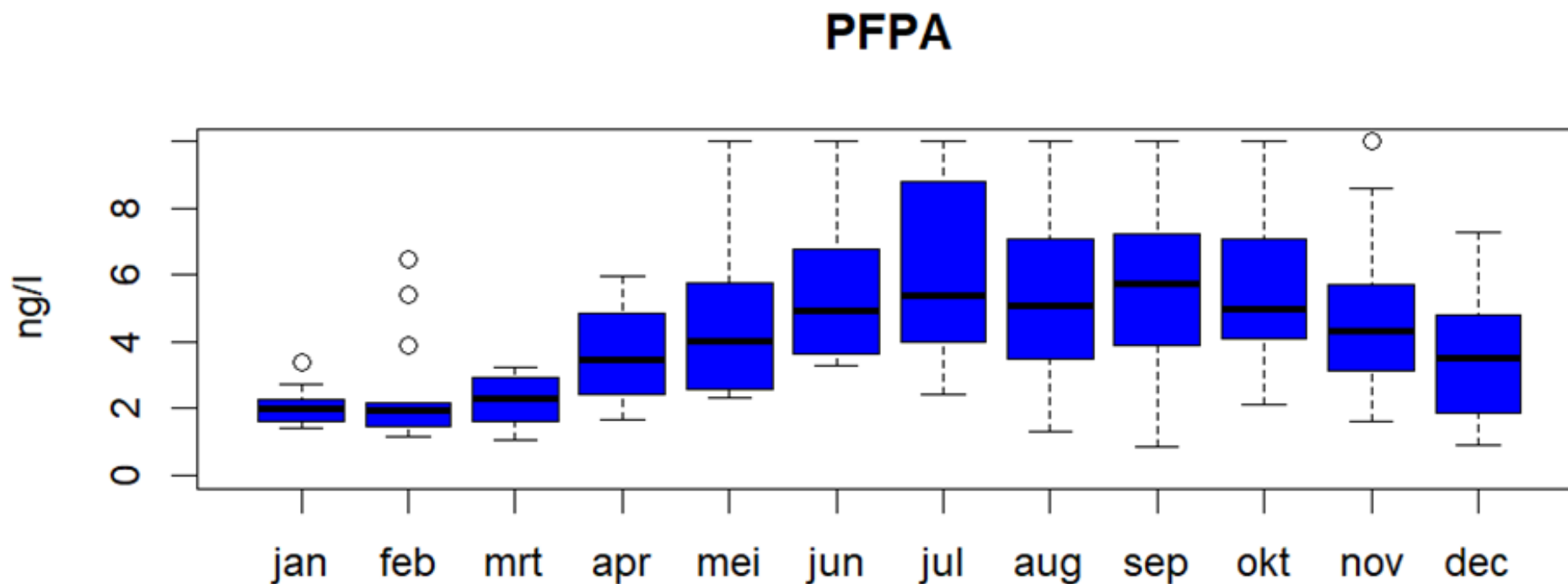


# In totaal 10 'herhalende clusters' van stoffen

1. Metalen
2. Zouten en reactieve metalen
3. PAH
4. Herbiciden
5. PCB
6. AH
7. Geneesmiddelen
8. Contrast-middelen
9. Beta-blockers, diuretica
10. PFAS

Recurring Cluster Number	Substances	3 example Clusters in Locations	Description
RC 1	Aluminum, barium, beryllium, cadmium, cesium, chromium, iron, cobalt, copper, mercury, lithium, lead, manganese, rubidium, thallium, tin, titanium, vanadium, zinc, nickel, arsenic	LOB_20 NGN_18 MMM_5	Metals Sometimes combined with PAH substances
RC 2	Boron, calcium, chloride, potassium, lithium, magnesium, molybdenum, sodium, rubidium, strontium, sulfate, uranium, bromide, silicate as Si	NGN_34 BRI_1 KAM_14	Salts and reactive (alkali) metals
RC 3	benzo(a)anthracene, benzo(a)pyrene, benzo(b)fluoranthene, benzo(ghi)perylene, benzo(k)fluoranthene, chrysene, dibenzo(a,h)anthracene, fluoranthene, indeno(1,2,3-cd)pyrene, pyrene, phenanthrene, anthracene	LOB_22 NGN_30 EYS_8	Polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) (fossil fuel burning) In some clusters together with PCBs like VWZ_4, HAV_21
RC 4	Cyanazine, desethyl-terbutylazine, dimethenamide, dimethenamide-p, metolachlor, terbuthylazine, ethofumesate, metobromuron, linuron	NGN_28 NSL_20 BRA_28	Herbicides
RC 5	2,2',3,4,4',5'-hexachlorobiphenyl (PCB 138), 2,2',4,4',5,5'-hexachlorobiphenyl (PCB 153), 2,2',4,5,5'-pentachlorobiphenyl (PCB 101), 2,2',5,5'-tetrachlorobiphenyl (PCB 52), 2,3',4,4',5-pentachlorobiphenyl (PCB 118), 2,3,4,5,2',4',5'-heptachlorobiphenyl (PCB 180), 2,4,4'-trichlorobiphenyl (PCB 28)	NGN_6 KMW_4 BRA_38	Polychlorinated Biphenyls (PCBs) (industrial and commercial applications)
RC 6	1,2-dimethylbenzene (o-xylene), 1,2,4-trimethylbenzene, Benzene, Ethylbenzene, methylbenzene (toluene), 1,2,3-trimethylbenzene, 1,3,5-trimethylbenzene, 2-ethyltoluene, Ethenylbenzene, n-propylbenzene	KAM_2 NGN_2 KEI_1	Aromatic hydrocarbons (petrol oil and fuel)
RC 7	10,11-dihydro-10,11-dihydroxycarbamazepine, carbamazepine, oxazepam, primidone, sulfamethoxazole, temazepam	NGN_4 AND_2 BRA_16	Pharmaceuticals
RC 8	Amidotrizoic acid, ethylenediaminetetraethanoic acid (EDTA), jopamidol, joxitalamic acid jopromide, johexol	LOB_21 NGN_19 BRA_14	Contrast-agents
RC 9	Bisoprolol, guanylureum, sotalol, hydrochlorothiazide, atenolol, metoprolol	AND_17 BRA_21 LOB_18	Beta blockers, diuretics

# Concentraties variëren gedurende het jaar





# Wat verklaart de stofconcentratiedynamiek over de gehele recente meetperiode? Model met *vrachten*.

## Variabelen regressie model

"RH" → locale regen per etmaal

"gesuspendeerde.stoffen" → opwerveling

"zuurgraad.(pH)" → staat van stoffen

"DOC.(opgelost.organisch.koolstof)" → opwerveling

"orthofosfaat.als.PO4" → afspoeling + overstort?

"waterstofcarbonaat" → grondwater?

"waterafvoer" → verdunning

"temperatuur" → afbraak, seizoen

"Tsince20Max" → afspoeling

"Jaar" → jaarvariatie emissie

"Place" → plekvariatie emissie

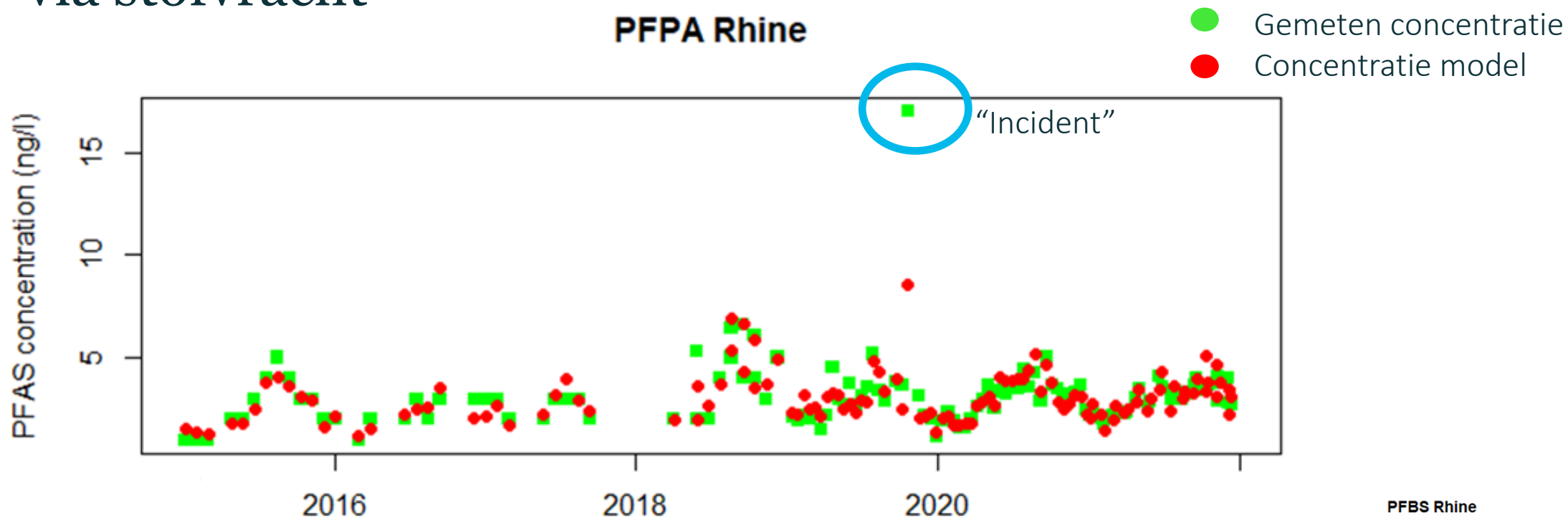
"chloride" → afvalwater, lozingen

"stikstof.Kjeldahl" → overstort?

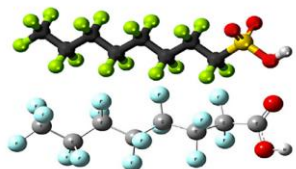
"Oost", "West" → wind

"min48hRH" → regenval 2 dagen geleden

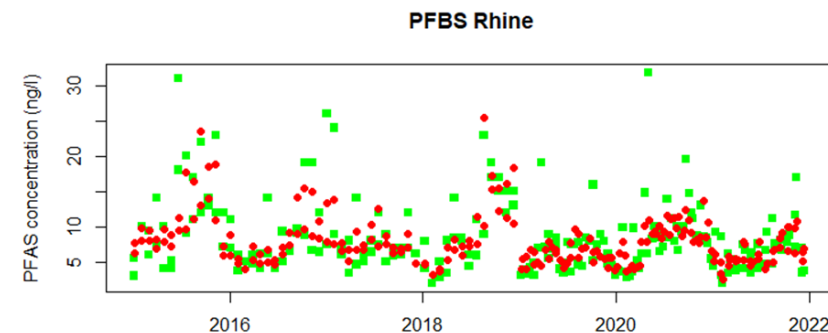
# Regressiemodel: verklaren concentratiedynamiek via stofvracht



H2O ACTUEEL - H2O VAKANTIEKELEN - H2O PODIUM - H2O MENSEN - H2O TECHNIEK - H2O PREMIUM - WATER MATTERS



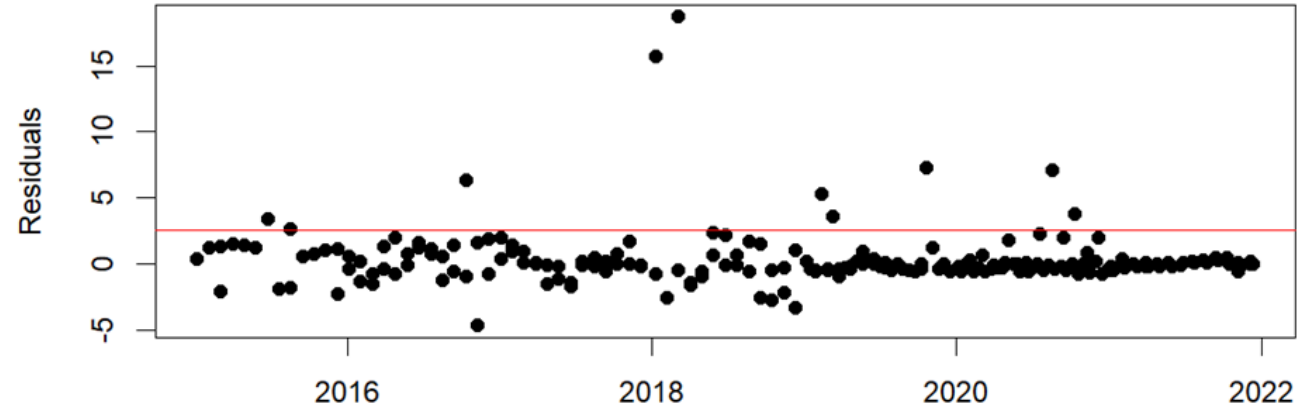
World: Australia PFAS Chemicals Map



# Regressie model

Vanuit residuals: 'Incidenten' → %

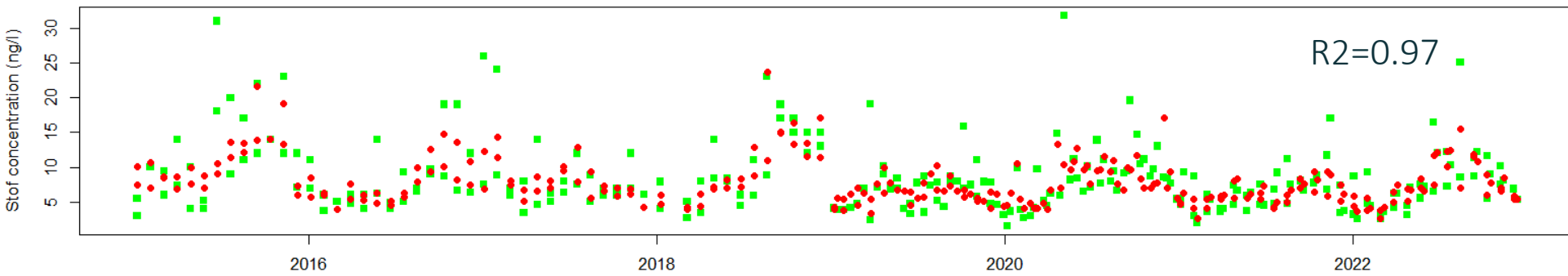
perfluorooctaansulfonzuur.(PFOS)



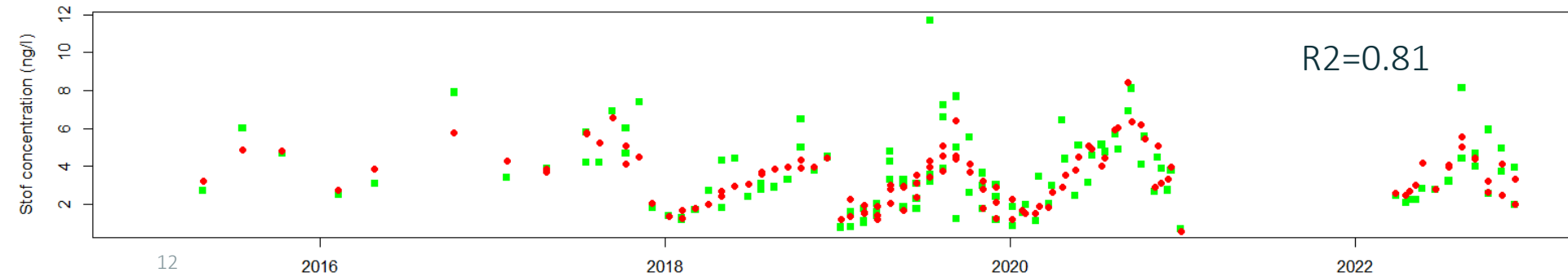
PFAS	R2	Residual standard error	% possible incidents	Only discharge Residual standard error	% improvement to base discharge model
PFOS	0.96	0.4001	5.0	0.5618	29
PFPA	0.96	0.2294	1.7	0.3484	34
PFPS	0.99	0.1571	5.2	0.1976	20
PFHxA	0.99	0.2038	2.2	0.2846	28
PFOA	0.99	0.2291	10.4	0.2709	15
PFHxS	0.99	0.2051	8.8	0.2862	28
PFBA	0.83	0.6354	4.8	0.7262	13
PFBS	0.97	0.3655	10.2	0.529	31
PFHpA	0.97	0.2256	6.7	0.2965	24
PFNA	0.95	0.2204	2.6	0.3214	31
TFAhC <sup>11</sup>	0.99	0.2198	12.4	0.2426	9

Incidenten zijn, voor het overgrote deel, individuele PFAS

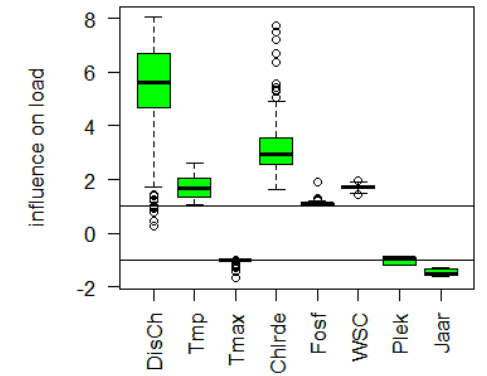
L\_PFBS Rhine



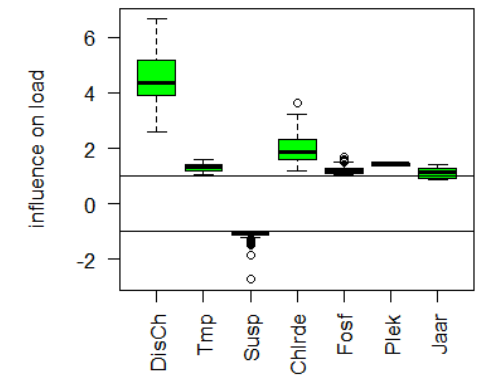
L\_PFBS Meuse



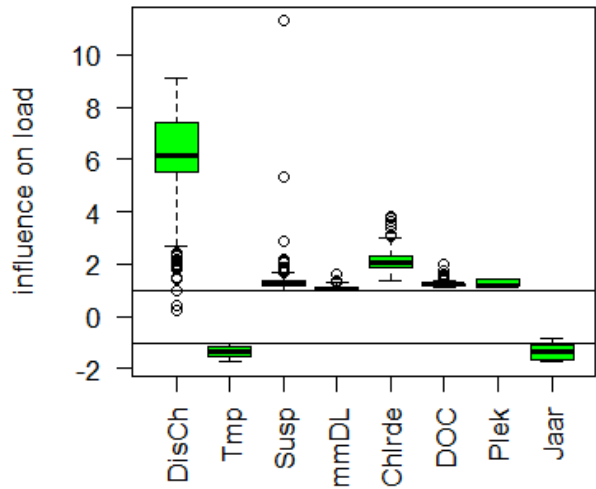
L\_PFBS Rhine



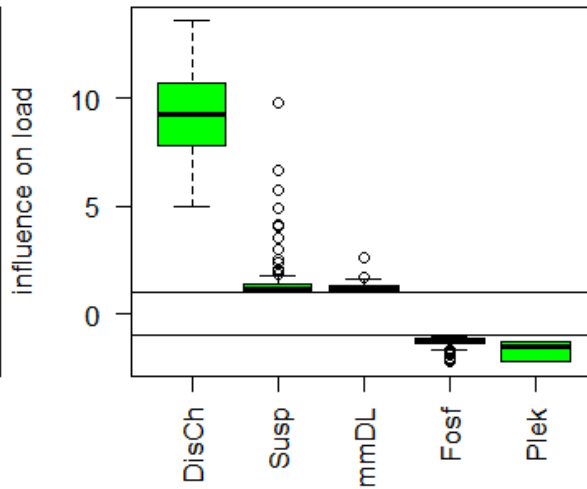
L\_PFBS Meuse



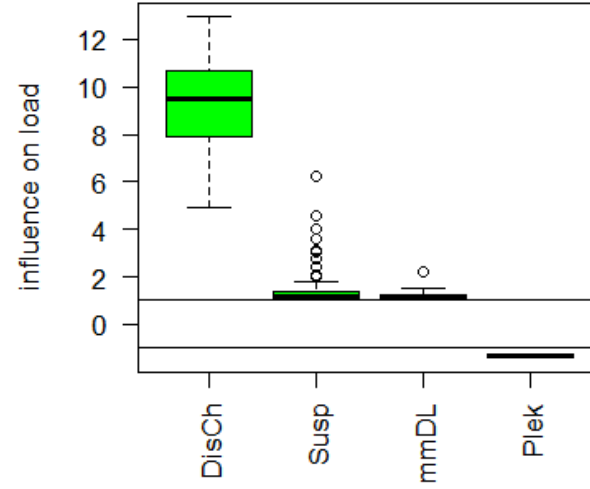
BaA Rhine



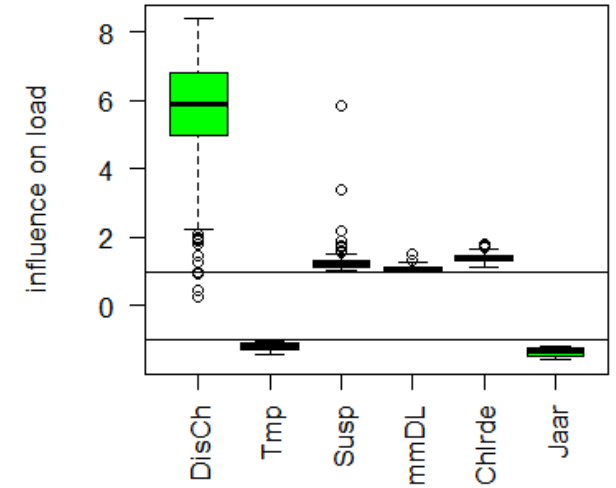
BaA Meuse



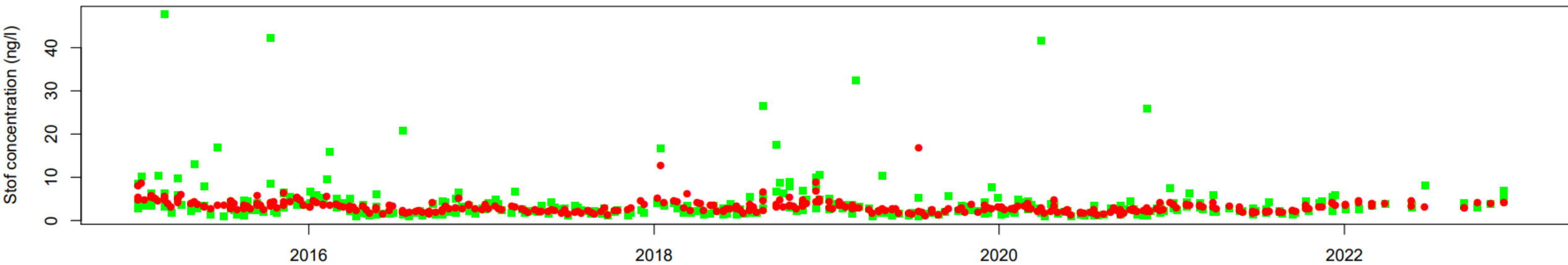
BaP Meuse



BaP Rhine



BaA Rhine



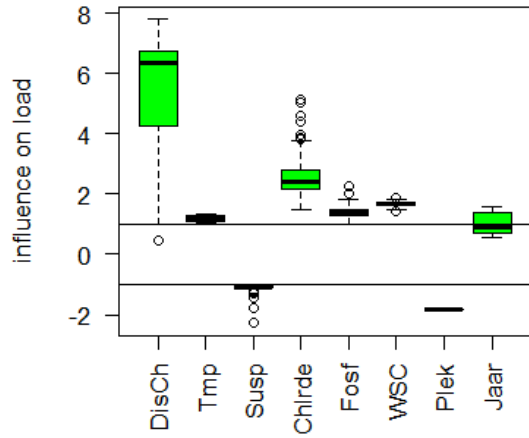


# Farmaceutica

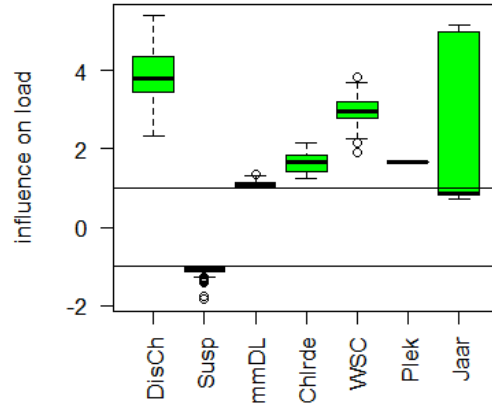
Afvoer  
Chloride  
Waterstofcarbonaat



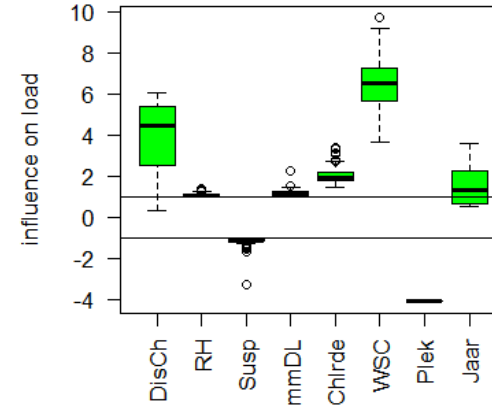
### t1011DHOx101 Rhine



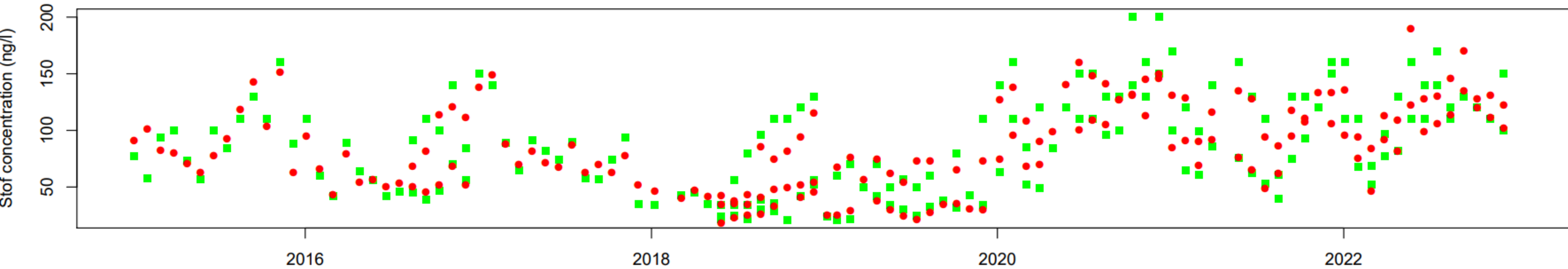
### oxzpm Meuse



### oxzpm Rhine



### t1011DHOx101 Rhine

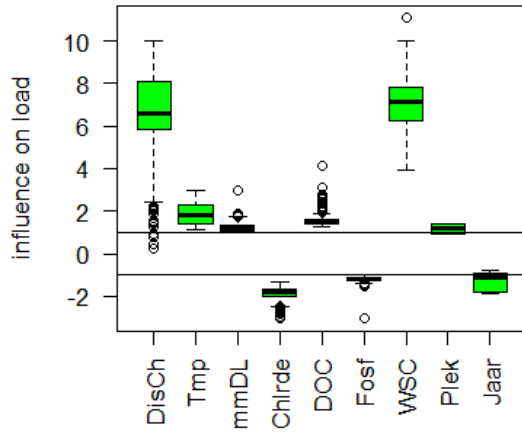




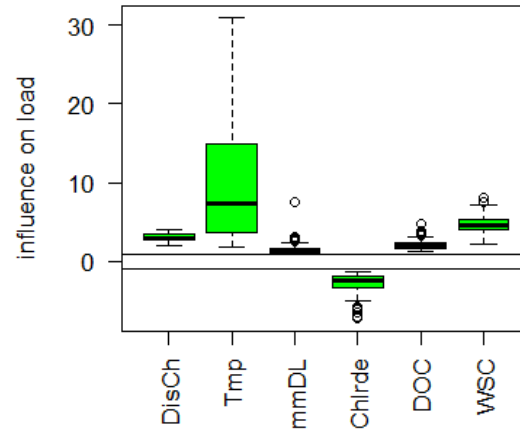
# Herbiciden

Afvoer  
Temperatuur  
Waterstofcarbonaat

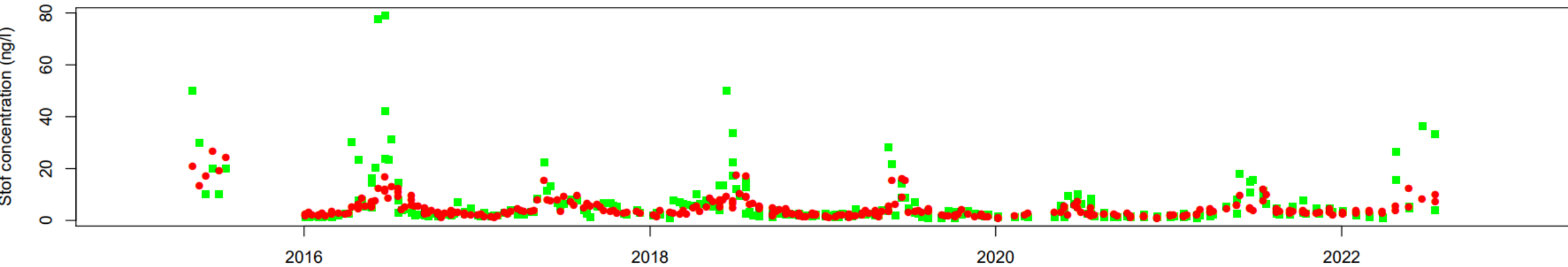
### metICI Rhine



### metICI Meuse



### DmtnmdP Rhine





## Uitdagingen:

### Regressiemodellen:

- Invloed variabelen kan verschillend zijn voor stoffen  
(bv Temperatuur: *extra afbraak vs seizoenseffect vs extra verdamping*)
- Variabelen niet altijd consistent, data heeft ruis
- Veel stoffen
- Nog geen voorspelling / mechanisme



## Categorieën in stofconcentratie-verklaarbaarheid

- 1. De stof is goed te verklaren met een model met alleen klimaatparameters
- 2. De stof is goed te verklaren met klimaatparameters + extra parameters
- 3. De stof is niet goed te verklaren maar extra parameters helpen wel
- 4. De stof is niet goed te verklaren

1	2	3	4
kalium 2,6-dichloorbenzamide.(bam) ethofumesaat perfluorocetaanzuur.(pfoa)	aminomethylfosfonzuur.(ampa) benzeen imidacloprid perfluorocetaanzuur.(pfa)	dimethenamide-p	2-(perfluorhexyl)ethaan-1- sulfonzuur.(6:2.fts) methylbenzeen.(tolueen)

- voorbeelden-

# Conclusie

- Veel stoffen hebben verklaarbare concentratiepatronen
- Stoffen met gelijke eigenschappen clusteren bij elkaar en deze clusters zijn te herkennen in het stroomgebied Maas en Rijn
- Incidenten vormen voor sommige stoffen een relatief groot deel van de vracht
- Voor PFAS zijn de incidenten uniek per PFAS
- Nu verklaren, in de toekomst voorspellen? Klimaatverandering.

(mengsel) toxiciteit

Innamestops drinkwater





Groningehaven 7  
3433 PE Nieuwegein  
The Netherlands

T +31 (0)30 60 69 511

E [info@kwrwater.nl](mailto:info@kwrwater.nl)

I [www.kwrwater.nl](http://www.kwrwater.nl)



@KWR\_Water



KWR



KWR\_Water



 Tessa Pronk



 Elvio Amato



# Colophon

**KWR | Juni 2024 |**

**Project number**

-

**Project manager**

-

**Client**

-

**Quality Assurance**

-

**Author(s)**

Tessa Pronk

**Presented at**

- Emissiesymposium 2024

**Keywords**

Monitoring, trendanalyses, clustering

**Copyright**

This presentation is not a public document  
and is only provided to the client.