

TOEPASSING VAN GREAT-ER, EEN BLOOTSTELLINGSMODEL VOOR CHEMICALIEN, OP HET RUPELSTROOMBEKKEN

F. VERDONCK*, G. BOEIJE*,
P.A. VANROLLEGHEM*, T.C.J.
FEIJTEL** & D. SCHOWANEK**

* Universiteit Gent
BIOMATH Departement

** Procter & Gamble Eurocor en
ECETOC

APPLICATION OF GREAT-ER, AN EXPOSURE TOOL FOR CHEMICALS, ON THE RUPEL BASIN

In the GREAT-ER project (Geography-referenced Regional Exposure Assessment Tool for European Rivers), an accurate aquatic exposure prediction tool for chemicals was developed and validated for use within environmental risk assessment schemes. The software system GREAT-ER 1.0 calculates the distribution of predicted environmental concentrations (PECs) of consumer chemicals in surface waters, for individual river stretches as well as for entire catchments. GREAT-ER has been validated by comparing simulations with the results of an extensive monitoring campaign for two 'down-the-drain' chemicals, i.e. the detergent ingredients boron and Linear Alkylbenzene Sulphonate (LAS).

In this paper, the application of the GREAT-ER methodology to the Rupel basin in Belgium is presented. Spatial concentration patterns of the anionic surfactant LAS were predicted for this basin. Different scenarios and case studies were simulated. LAS removal in waste water treatment plants is high (98-99.9%). Results show that wastewater treatment plants have a significant though local improvement on LAS-concentrations in the rivers. For some subbasins, calculated PEC-values were positioned against biological and physico-chemical water quality measurements. Validation of the GREAT-ER predictions in the Rupel basin is planned and GREAT-ER 1.0 is currently being expanded with models for terrestrial (diffuse input), air and estuarine compartments.

GREAT-ER staat voor "Geography-referenced Regional Exposure Assessment Tool for European Rivers" d.w.z., een geografisch-gerefererd regionaal blootstellingsmodel voor Europese rivieren. GREAT-ER is speciaal ontworpen om concentraties van individuele stoffen (bv. detergents, farma) die via huishoudelijk afvalwater in rivierbekkens terechtkomen, accuraat te voorspellen en te visualiseren met behulp van een Geografisch Informatie Systeem (GIS). De uitvoer van GREAT-ER 1.0 is drievoudig: een kleurenkaart met concentratiedistributies van chemicaliën in de rivier, concentratieprofielen en geaggregeerde concentraties. Binnen de Europese wetgeving is er nood aan dergelijke modellen om risicobeoordeling ("risk assessment") toe te passen voor chemicaliën, die op de Europese markt komen. De impact op het milieu moet op voorhand accuraat voorspeld kunnen worden.

In België werd op initiatief van ECETOC (European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals) GREAT-ER toegepast op het Rupelstroombekken door de vakgroep Biomath (UG). Einddoel was een verkennende simulatie uit te voeren voor een

referentieverbinding (de oppervlakte-actieve stof LAS: lineair alkylbenzeensulfonaat) in het Rupelstroombekken. Verschillende mogelijke gevallenstudies en scenario's werden bestudeerd. Resultaten tonen ondermeer aan dat de zuiveringstoestand in het Rupelbekken zeer heterogeen is en dat rioolwaterzuiveringsinstallaties een grote positieve, doch ruimtelijk beperkte invloed hebben op LAS-concentraties in de rivieren. Validatie van het Rupelbekken en verdere ontwikkeling van het GREAT-ER systeem met o.a. modules voor diffuse input is gepland, zodat een breder gamma aan stoffen kan gemodelleerd worden.

1. INLEIDING

De zorg om waterkwaliteit, en meer algemeen een goede milieuhygiëne, is de laatste jaren sterk gegroeid. Naast de reeds talrijke bestaande modellen ter voorspelling van de algemene waterkwaliteit, neemt het belang toe van modellen ter voorspelling van concentraties van specifieke chemicaliën. De Europese regelgeving op het vlak van chemicaliën en producten maakt bijvoorbeeld gebruik van dergelijke model-

len om risicobeoordeling ("risk assessment") toe te passen voor nieuwe en bestaande stoffen, die op de Europese markt komen. Het effect op het milieu moet op voorhand kunnen worden voorspeld met voldoende betrouwbaarheid om vals-positieve en vals-negatieve risico-inschattingen te vermijden.

Bij de risicobeoordeling wordt de concentratie van een chemische stof in het milieu (PEC: Predicted Environmental Concentration) vergeleken met de hoogste concentratie, die geen toxisch effect heeft op de structuur in functie van het ontvangende ecosysteem (PNEC: Predicted No Effect Concentration) (Feijtel et al., 1997).

Huidige technieken ter bepaling van de PEC zijn niet geografisch gerelateerd. Ze maken gebruik van de zogenaamde "unit world approach", waar het milieu wordt voorgesteld door verschillende hypothetische compartimenten (lucht, water, bodem, sediment en biota). Een chemische stof zal zich in een evenwichtssituatie verdelen in die compartimenten volgens zijn fysico-chemische en biologische eigenschappen (Mackay, 1991) (zie Fig. 1 bovenaan).

GREAT-ER staat voor "Geography-referenced Regional Exposure Assessment Tool for European Rivers", d.w.z., een geografisch-gerefereerd regionaal blootstellingsmodel voor Europese rivieren. Door de geografisch gerefereerde aanpak zullen concentraties accurater worden voorspeld en kan een verfijnde risicobeoordeling worden doorgevoerd.

GREAT-ER is speciaal ontworpen, op initiatief van de Europese chemische industrie, om concentraties van nieuwe en bestaande individuele chemicaliën die vooral via huishoudelijk afvalwater in het milieu terecht-

komen (bv. detergents, farmaca) in rivierbekkens, accurater te voorspellen en te visualiseren. Dit laatste gebeurt met behulp van een Geografisch Informatie Systeem (GIS). De concentraties worden berekend aan de hand van verschillende chemische, biologische en hydrologische modellen. Bijgevolg zijn geografisch gerelateerde invoergegevens nodig voor het model (Feijtel et al., 1997; Schowanek et al., in druk) (zie Fig. 1 onderaan). Deze omvatten voornamelijk een digitaal riviernetwerk, debiets- en stroomsnelheidsgegevens, regio-specifieke marktgegevens, riolerings- en water-

zuiveringsinfrastructuurgegevens. Bestanden met dergelijke gedetailleerde informatie zijn in toenemende mate beschikbaar in Europa, zij het niet altijd op publiek toegankelijke en gecentraliseerde wijze.

2. CONCEPT EN SYSTEEMONTWIKKELING

De nuttige informatie die met GREAT-ER 1.0 bekomen wordt, is drievoudig (Schowanek et al., in druk):

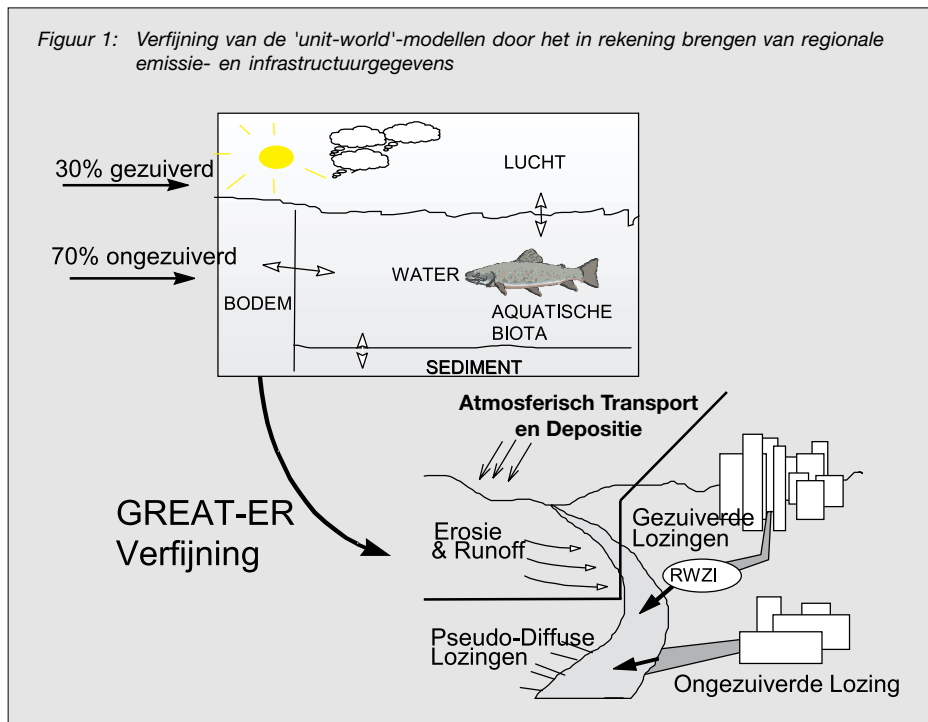
- 1) Een kleur-gecodeerde kaart met de distributies van concentraties van chemicaliën in de rivier (Fig. 4).
- 2) Een profiel van concentraties van chemicaliën in functie van de afstand voor een geselecteerde tak van een rivier (Fig. 5).
- 3) Geaggregeerde PEC's (d.i. PEC_{initieel} en $PEC_{\text{stroombekken}}$) om alle berekende concentraties van een stroombekken te integreren tot één enkele waarde.

GREAT-ER 1.0 is gevalideerd voor de chemische stoffen Boor (B) en lineair alkylbenzeensulfonaat (LAS) in zes pilotgebieden, waarvan vier in het Verenigd Koninkrijk (Holt et al., 1998; Fox et al., 1999a,b), één in Duitsland (Schulze et al., 1998), en één in Italië (Whelan et al., in druk), aan de hand van een twee jaar durende monitoring-campagne. De resultaten illustreren dat PEC's zeker beter dan met een factor 5 nauwkeurig konden worden voorspeld (voorspeld gemiddelde t.o.v. gemeten gemiddelde). Dit is een aanzienlijke verbetering in vergelijking met de 'multimedia'-modellen die doorgaans slechts een factor 100 tot 1000 nauwkeurig zijn (Hennes & Rapaport, 1989) maar in vergelijking met de klassieke waterkwaliteitsmodellen voor verbetering vatbaar is. Figuur 2 illustreert dit voor een gevalideerd pilotstudiegebied in Yorkshire, UK. Naast de meetresultaten met de standaardafwijking zijn ook weergegeven de gesimuleerde concentraties met 90-percentiel (variabiliteit en onzekerheid) (Schowanek et al., in druk). Naar de toekomst toe is een nog verdere verbetering van de voorspellingen te verwachten door een betere schatting van sommige belangrijke parameters zoals het aantal inwoners verbonden met een lozingspunt, afbraak in de riolering en de rivier, enz...

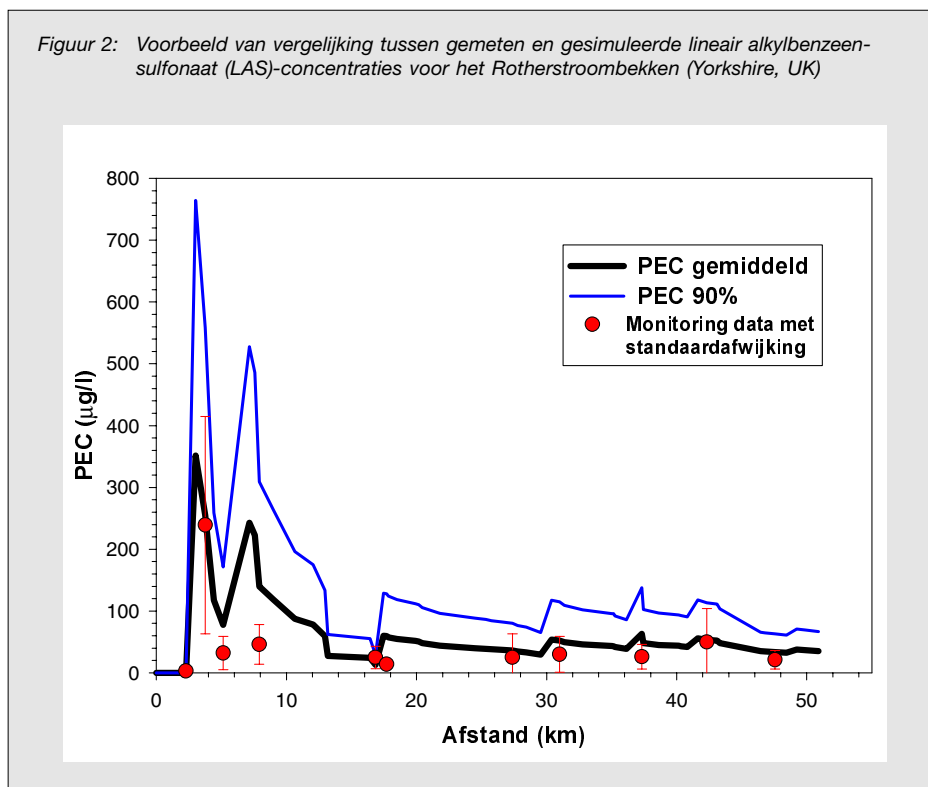
Het uiteindelijke resultaat van de eerste fase van het GREAT-ER project is een CD-ROM die de GREAT-ER software en complete gegevenssets (voor 4 stroombekkens in Yorkshire (UK), 1 in Italië en 2 in Duitsland) bevat. Na invoer van de karakteristieken van een te bestuderen stof, kan het aangewend worden als blootstellingsmodel. Het programma draait op een PC en heeft zowel Microsoft Windows NT als ArcView® nodig. Een kopie van de CD-ROM en handleiding kan gratis bekomen worden bij ECETOC (onder licentieovereenkomst).

In België werd GREAT-ER toegepast op het Rupelstroombekken en hierover wordt in deze bijdrage gerapporteerd. Het

Figuur 1: Verfijning van de 'unit-world'-modellen door het in rekening brengen van regionale emissie- en infrastructuurgegevens



Figuur 2: Voorbeeld van vergelijking tussen gemeten en gesimuleerde lineair alkylbenzeensulfonaat (LAS)-concentraties voor het Rotherstroombekken (Yorkshire, UK)



Rupelstroombekken omvat ca. 1/3 van het Scheldebekken, goed voor zo'n 6700 km² (zie Fig. 3). Het Rupelbekken is tot nog toe het grootste stroombekken waarop GREAT-ER werd toegepast. Het Rupelbekken heeft zo'n 3,5 miljoen inwoners en 1800 lozingspunten. Ter vergelijking, het Aire-bekken in Engeland heeft zo'n 2 miljoen inwoners en slechts 34 lozingspunten.

De belangrijkste rivieren in het Rupelbekken zijn de Zenne die door Brussel stroomt, de Dijle die door Leuven stroomt, de Demer die Hasselt en Diest passeert en de Grote en Kleine Nete die in Lier samen de Nete vormen. Al deze rivieren komen samen in een relatief korte maar brede rivier: de Rupel.

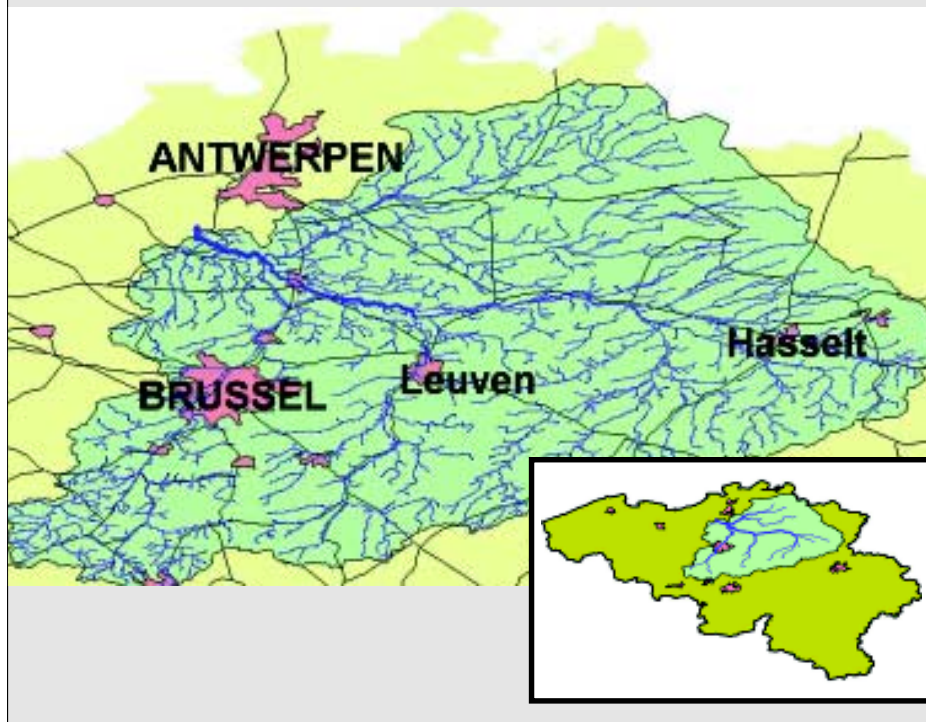
Deze pilotstudie werd uitgevoerd om de haalbaarheid te testen van een GREAT-ER implementatie van een stroombekken op relatief korte termijn (6 maanden) en met beperkte middelen, om zo de haalbaarheid van de GREAT-ER toepassing op Europese schaal in te schatten. Onderzoek naar optimaal niveau van geografisch detail is daarbij heel belangrijk. Einddoel was een verkennende simulatie uit te voeren voor een referentiemolecule (de oppervlakte-actieve stof LAS: lineair alkylbenzozulfonaat) in het Rupelstroombekken. Verschillende mogelijke gevallenstudies en scenario's werden bestudeerd.

3. METHODOLOGIE

Alle door het systeem vereiste basisgegevens (hydrologie en emissies) werden ter beschikking gesteld door diverse Vlaamse en Waalse overheidsinstanties en operatoren. Alle gegevens werden verwerkt en geïmplementeerd in GREAT-ER, zoveel mogelijk met behulp van (semi-) automatische procedures.

Verschillende eenvoudige empirische hydrologische modellen werden nader bestudeerd aangezien geen hydrologische gegevens beschikbaar waren voor het volledige bekken (Verdonck, 1999). Het model waarin de relatie tussen het debiet op een plaats en de som van de lengtes van alle rivieren stroomopwaarts van deze plaats wordt genomen, kwam als de beste methode naar voren. Deze methode steunt op massabalansen en beschrijft daardoor goed de verdunning optredend bij samenvloeiingen. Toch werd voor deze methode niets in de literatuur teruggevonden. De nauwkeurigheidfactor van de experimenteel versus berekende debieten varieerde van 1 tot 3. Deze afwijking kan sterk gereduceerd worden indien een volledig hydrologisch model beschikbaar is, maar is aanvaardbaar als eerste benadering, rekening houdend met de doelstellingen van GREAT-ER, waarin een nauwkeurigheidfactor beter dan 5 nagestreefd wordt (Feijtel et al., 1997). Buiten het gebied van 0,2 en 9 m³/s werden debieten geschat door extrapolatie en de onzekerheid is daar dan ook groter. Met PEC-waarden bij dergelijke

Figuur 3: De situering van het Rupelstroombekken in België



debieten dient men dan ook voorzichtiger om te springen.

Gezien GREAT-ER een steady-state benadering volgt, is het model niet aangewezen voor de delen van het bekken dat onder invloed staat van getijden. Daardoor kunnen geen betrouwbare interpretaties worden gemaakt in tijrivieren en in de beken die erop lozen.

4. RESULTATEN EN BESPREKING

Simulatie: huidige situatie

LAS (lineair alkylbenzozulfonaat) is wereldwijd één van de belangrijkste anionische oppervlakte-actieve stoffen, die wordt gebruikt in detergents. De verwijderings-efficiënties in RWZI en rivieren zijn in Tabel 1 voorgesteld. LAS is goed biodegradeerbaar: het breekt iets sneller af dan de gemiddelde huishoudelijke vuilvracht (BOD), en kan als model staan voor 'algemene organische verontreiniging'.

Het resultaat van een verkennende GREAT-ER simulatie in het Rupelstroombekken voor LAS is weergegeven in Fig. 4. Tevens werd

Tabel 1: Verwijderingsefficiënties van commercieel LAS* in RWZI en rivieren (Schowanek et al., in druk)

Totaal-verwijdering RWZI met actief slib	98 - 99,5 %
Totaal-verwijdering RWZI oxidatiebed	94 - 98 %**
'In-stream-removal'*** (1 ^o orde afbraaksnelheid)	0,06 h ⁻¹
LAS-consumptie per persoon	1,46 kg/jaar

* commercieel LAS met C₁₀₋₁₃ en C_{11,6} als gemiddelde ketenlengte

** gemiddelde waarde voor UK oxidatiebedden

*** representatieve gemiddelde waarde voor centraal-Europese rivierbekkens

een langsprofiel geconstrueerd voor de Kleine Nete (zie Fig. 5).

De vier kleurcategorieën duiden de vier kwartelen van de LAS-concentraties aan (Fig. 4). Deze PEC-klassen kunnen ook zelf naar keuze worden ingesteld. Twee duidelijke gebieden zijn te herkennen die lagere concentraties LAS bevatten: het Netebekken en de brongebieden van de Dijle. Daarnaast bevat het Demerbekken eerder 'intermediaire' concentraties LAS, maar het Zennebekken en het stroomafwaartse Dijlebekken bevatten hoge tot zeer hoge concentraties LAS (Fig. 4). Dit patroon komt grotendeels overeen met de algemene waterkwaliteit in het Rupelstroombekken. Merk op dat LAS slechts een klein deel uitmaakt (minder dan 1%) van de totale biologische zuurstofvraag (BOD) (ECETOC, 1999) en daarom niet éénduidig gecorreleerd is met de algemene waterkwaliteit. Het lijkt echter wel een goede indicator voor de huishoudelijke vervuilinggraad, die toch nog aanzienlijk is in het Rupelbekken.

Het is belangrijk de voorspellingen niet te interpreteren tot op de kilometer nauwkeurig. Diffuse lozings werden immers als

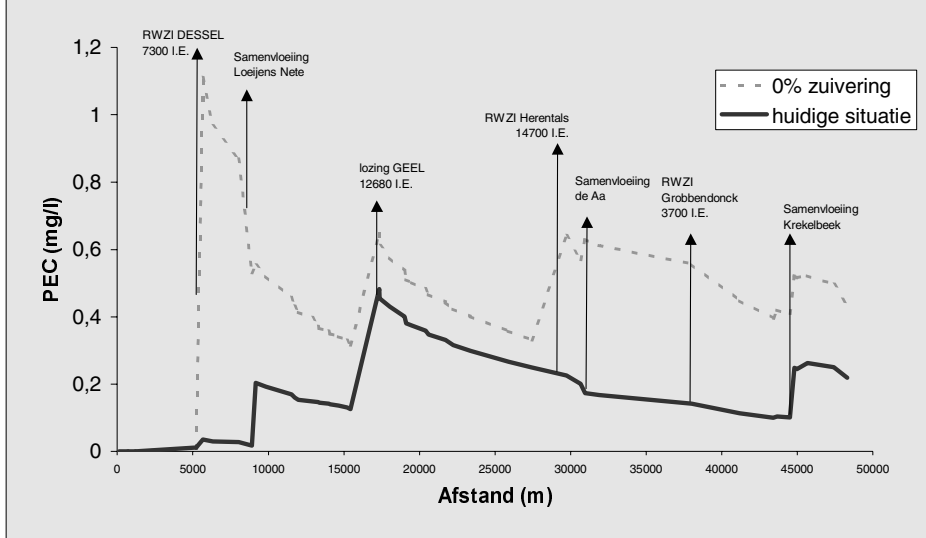
Figuur 4: Voorspelde gemiddelde blootstellingsconcentraties (in mg/l) voor LAS op het Rupelstroomgebied



Tabel 2: Resultaten PEC [mg/L] voor LAS voor het Rupelstroomgebied en het Airebekken

	Rupelbekken (B)	Aire (UK)
PEC _{initieel}	5,13	0,93
PEC _{stroomgebied} gewogen volgens volume	0,90	0,03
PEC _{stroomgebied} gewogen volgens lengte	1,22	0,04

Figuur 5: Gemiddelde LAS-concentratieprofiel in de Kleine Nete (concentratie van LAS in ordinaat en de afstand langs de rivier van bron tot monding in abscis)



puntlozingen per riviersegment beschouwd, verschillende kleinere (of naburige) lozingen werden geaggregeerd tot één lozingspunt, en het rivierennetwerk werd tevens vereenvoudigd.

Een geaggregeerde PEC is een representatieve concentratie voor het volledige stroomgebied (Boeije et al., 2000). Twee type's geaggregeerde PEC's werden gede-

finieerd voor risico-analyse met een GIS systeem: PEC_{initieel} (aggregatie van alle rivierconcentraties onmiddellijk stroomafwaarts van afvalwaterlozingen) en PEC_{stroomgebied} (aggregatie van de gemiddelde concentraties van alle riviersegmenten). Logischerwijze zal de PEC_{initieel} groter zijn dan de PEC_{stroomgebied}. De PEC_{stroomgebied} kan berekend worden volgens verschillende wegen. PEC_{initieel} en PEC_{stroomgebied} zijn res-

pectievelijk vergelijkbaar met de PEC_{lokaal} en PEC_{regionaal} zoals gedefinieerd in de EU-wetgeving. De resultaten voor de oppervlakte-actieve stof LAS in het Rupelbekken zijn weergegeven in Tabel 2.

Ondanks het feit dat het Rupelbekken voor LAS nog niet werd gevalideerd, lijkt het toch duidelijk dat de belasting van LAS enkele factoren hoger ligt dan in het Verenigd Koninkrijk.

Simulatie: huidige situatie (langsprofielen)

Om de resultaten beter te kunnen interpreteren werd een hypothetische 'geen waterzuivering'-hypothese gesimuleerd: deze vormt als het ware een soort blanco-bepaling. Ze beschrijft de toestand zonder zuiveringsinspanningen (Fig. 5).

Een aantal conclusies kan uit dit scenario worden getrokken:

- De voorspelde gemiddelde LAS-concentratie in de rivier is sterk afhankelijk van de zuiveringsgraad (aantal aangesloten IE), het rivierdebiet, het aantal inwoners per lozing en de biodegradatie (in de rivier).
- De aanwezigheid van rioolwaterzuiveringsinstallaties (RWZI) resulteert in een zeer efficiënte verwijdering van LAS (Fig. 5). De RWZI te Dessel en Herentals zorgen voor een significante daling van PEC's in de Kleine Nete in vergelijking met het ongezuiverde scenario. Dit komt tevens tot uitdrukking in de algemene waterkwaliteit (hier niet weergegeven). De ongezuiverde lozing te Geel zorgt voor een duidelijke LAS-piek in de Kleine Nete.
- De lozing van 7.300 I.E. te Dessel zorgt voor een grotere concentratiestijging dan de dubbel zo grote lozing van 14.700 I.E. te Herentals. Dit is evident te verklaren door de debietsverschillen in de rivier. Stroomopwaarts van Dessel is het debiet slechts 0,25 m³/s; te Herentals is het reeds negen keer hoger namelijk 2,3 m³/s.
- De daling van de concentratie LAS in de langsprofielen heeft twee oorzaken. Enerzijds is er verdunning te wijten aan toenemende debieten stroomafwaarts en samenvloeiingen met niet vervuilde rivieren. Anderzijds speelt biodegradatie een niet te verwaarlozen rol.

Andere bestudeerde langsprofielen toonden een grilliger verloop, waar verdunningen en biodegradatie minder duidelijk herkenbaar zijn. Dit wordt veroorzaakt door de vele en sterk verspreide lozingspunten (hier niet weergegeven).

Scenario's

Er kunnen verschillende scenario's worden gesimuleerd om beleidsbeslissingen te ondersteunen. Hieronder wordt slechts één voorbeeld gegeven. Het is uiteraard mogelijk om analoge studies te maken voor het volledige Rupelstroomgebied.

De Aa is een bijrivier van de Kleine Nete en stroomt door Turnhout (zie Fig. 6). Het Aabekken bevat 6 RWZI, waarvan 5 actief slibinstallaties en 1 oxidatiebed (Turnhout). In het Aabekken wordt ongeveer 80% van het huishoudelijk afvalwater gezuiverd. De resultaten zijn hiervan een weerspiegeling: relatief lage gesimuleerde PEC's werden teruggevonden.

Het concentratieprofiel (zie Fig. 7) toont duidelijk de rechtstreekse invloed van de RWZI van Oud-Turnhout en Turnhout. Ook de RWZI van Ravels, Vosselaar, Beerse en Lichtaart dragen via de bijrivieren onrechtstreeks bij tot de relatief lage LAS-concentraties in de Aa.

Merk op dat hier enkel wordt gekeken naar huishoudelijke lozingen en niet naar industriële lozingen, alhoewel dit wel mogelijk is met GREAT-ER.

De LAS-resultaten kunnen worden vergeleken met de algemene waterkwaliteit. De RWZI Ravels is hydraulisch overbelast maar biologisch sterk onderbelast en kampt regelmatig met hoge influentvrachten afkomstig van de industrie. De RWZI Turnhout is hydraulisch en biologisch zwaar overbelast. In de installatie wordt momenteel bijna het dubbele verwerkt van ze aankan; de helft daarvan is industrieel afvalwater. Daarom wordt zeer frequent ongezuiverd rioolwater overgestort (VMM, 1996). Daardoor zullen de werkelijk geloosde LAS-concentraties hoger zijn dan de gesimuleerde. De fractie verwijdering bij de RWZI werd immers niet gecontroleerd of aangepast aan de lokale situatie.

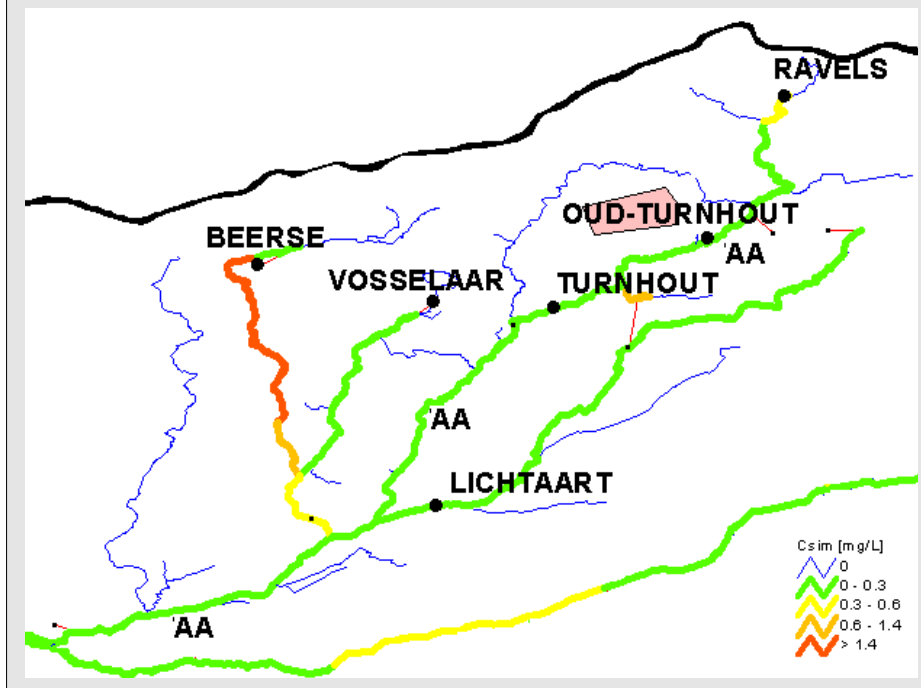
De renovatie van RWZI Turnhout zelf (o.a. de ombouw van de oxidatiebedden naar een actief slibstelsysteem) is voorzien. LAS wordt beter verwijderd in actief slibsystemen dan in oxidatiebedden (zie Tabel 1). Het effect van deze ombouw werd bestudeerd met GREAT-ER. Het resultaat is weergegeven in Fig. 8. Het effect is duidelijk merkbaar doch slechts beperkt in afstand. Na 10 km (d.i. na de samenvloeiing met de Laak) zijn de LAS-concentraties opnieuw bijna zo hoog als in de huidige situatie.

Ondanks het feit dat LAS-concentraties vrij laag zijn in de Aa, is de biologische en fysisch-chemische kwaliteit in het Aabekken slechts matig (VMM, 1996). Dit wordt waarschijnlijk veroorzaakt door de overbelasting van de RWZI en andere vormen van pollutie. Daarenboven werden de toch niet te verwaarlozen industriële lozingen (van niet-LAS-vervuiling) niet geïncorporeerd.

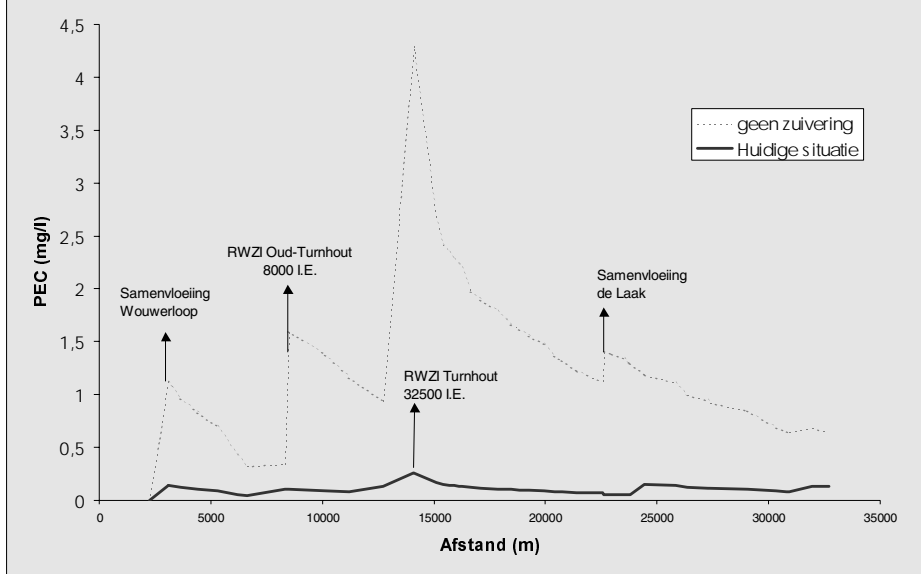
Verkennde validatie

Ook voor de Belgische pilootstudie werd op basis van bestaande meetgegevens (Direction des Eaux de Surface, 1997) een verkennende validatie uitgevoerd voor het niet biodegradeerbare chemische element Boor. De verschilfactor tussen experimentele en gesimuleerde concentraties werd telkens berekend (Tabel 3).

Figuur 6: GREAT-ER simulatie voor LAS in het Aabekken



Figuur 7: Concentratieprofiel LAS in de Aa



In alle staalnameplaatsen is voor het element Boor de GREAT-ER doelstelling (beter dan een factor 5; Feijtel et al., 1997) bereikt. De factor gesimuleerd versus experimenteel gemiddelde varieert van 0,7 tot 1,3.

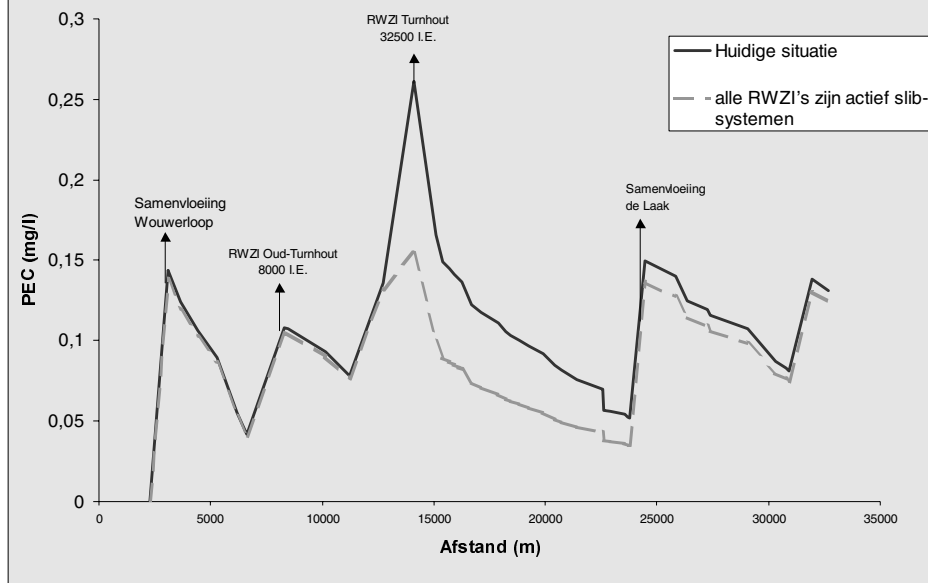
Ook een beperkt aantal meetgegevens over anionische detergents waren beschikbaar. LAS maakt het grootste deel uit van de anionische detergents. Een verkennende validatie wees uit dat de concentraties sterk

Tabel 3: Vergelijking van experimentele en voorspelde Boor-concentraties (mg/l)

Plaats	Experimenteel aantal	Experimenteel $C_{\text{gemiddelde}}$	Gesimuleerd $C_{\text{gemiddelde}}$	Factor*
Senne - Soignies	12	170	217	1,3
Senne - Quenast	26	167	124	0,7
Dyle - Bousval	13	100	131	1,3
Dyle - Limal	5	<100	75	>0,8
Dyle - Bierges	13	102	72	0,7
Dyle - Pecrot	26	132	176	1,3

* Factor = gesimuleerd gemiddelde / experimenteel gemiddelde

Figuur 8: Verschil tussen oxidatiebed en actief slib te Turnhout: concentratieprofiel voor LAS in de Aa



zijn overschat (factor 1,7 tot 6,3). De validatie van Boor wijst erop dat het verschil waarschijnlijk te wijten kan zijn aan biodegradatie in rioleringen. Deze afbraakfactor werd in de huidige simulatie, bij gebrek aan reële meetgegevens en om conservatieve redenen, nog niet in rekening gebracht.

Dit is echter wel mogelijk. Boeije (1999) vond in de literatuur voor LAS-percentages tussen 10% en 68%. Een verwijdering van 25% in de rioleringen resulteert in een significante verlaging van de LAS-concentraties.

Een significante verlaging van de LAS-concentraties werd vastgesteld. De nauwkeurigheidfactor ligt nu tussen 1,3 tot 4,9. Hiermee zijn de GREAT-ER doelstellingen wel gehaald.

Dit duidt op het grote belang van deze parameter. Indien echter geen gegevens beschikbaar zijn, is het verstandig 'worst case' te modelleren en 0% verwijdering in rioleringen aan te nemen, zoals eerder werd gedaan. Verdere studie op de effecten van riolering op verwijdering van pollutanten lijkt echter wel aangewezen.

5. BESLUIT

- GREAT-ER heeft voornamelijk tot doel een beleidsondersteunend model voor risico-beoordelingen te zijn. Het vormt een krachtig hulpmiddel om inzicht te verwerven in de relatie tussen lozingen van afvalwater en de stof-specifieke waterkwaliteit van de ontvangende oppervlaktewateren. Verscheidene doelstellingen kunnen worden vooropgesteld. Een mogelijk risico van een pollutant kan worden ingeschat ten aanzien van het aquatische ecosysteem. Het effect van een emissiereductie van vuilvrachten, aan de bron of door de waterzuivering, kan geëvalueerd worden. Noodzakelijke maatregelen kun-

nen worden nagegaan om een gegeven kwaliteitsdoelstelling te bereiken bij maximale benutting van het zelfreinigend vermogen van de waterlopen (LIFE programma, 1996).

- De uitvoer van GREAT-ER 1.0 is drievoudig: een kleurenkaart met concentraties van chemicaliën in rivieren, een concentratieprofiel en geaggregeerde concentraties. Het volledige Rupelbekken werd verzameld op CD-ROM.
- Er werd geïllustreerd dat investeringen in rioleringen en RWZI een duidelijke doch plaatselijke verbetering hebben op LAS-concentraties in de rivier. Het Rupelbekken is een heel heterogeen gebied met zuivere en meer vervuilde gedeelten. Dit is ook duidelijk te zien bij de LAS simulaties. Volgens een verkennende, conservatieve simulatie worden de waterkwaliteitsdoelstelling van 100 µg/l voor anionische detergenten (VMM, 1997) en de PNEC van 250 µg/l voor LAS (Feijt & Van De Plassche, 1995) vooralsnog vaak niet gehaald in het Rupelbekken.
- Validatie van de GREAT-ER voorspellingen: Een monitoringstrategie en -campagne wordt momenteel bestudeerd en moet toelaten de nauwkeurigheid van de voorspellingen te verbeteren.
- GREAT-ER wil in een tweede fase a) uitbreiden naar andere bekkens in Europa, b) de compartimenten bodem en lucht incorporeren (modelleren van terrestrische run-off en diffuse bronnen) en c) een 'client-server' toepassing met WWW-toegang implementeren.

DANKWOORD

De auteurs danken ECETOC (European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of

Chemicals), ERASM (Environmental Risk Assessment Steering Management Committee) van A.I.S.E. (Association Internationale de la Savonnerie, de la Détergence et des Produits d'Entretien) en CESIO (Comité Européen de Agents de Surface et Intermédiaires Organiques) en de 'UK Environment Agency' voor financieel en management ondersteuning.

De auteurs danken ook J-O. Wagner & F. Koormann (Universiteit Osnabrück, Duitsland), P. Troch, M. Antrop & C. Janssen (Universiteit Gent), W. Bauwens (VUB) voor hun wetenschappelijke inbreng; Y. Ronse en medewerkers (VMM), L. Heip & R. Carrette (AQUAFIN), F. Paulus en medewerkers (MRW, DRGNE), L. Van Craen (AMINAL, Afd. Water) en J. Heylen (AWZ, DIHO) als leveranciers van gegevens.

F. VERDONCK*, G. BOEIJ*,
P.A. VANROLLEGHEM*,
T.C.J. FEIJTEL** & D. SCHOWANEK**

* *BIOMATH Departement, Universiteit Gent, Coupure Links 653, 9000 Gent*

** *Procter & Gamble, Eurocor, Temselaan 100, 1853 Strombeek-Bever, en ECETOC, Van Nieuwenhuyselaan 4, bus 6, 1160 Brussel*

REFERENTIES

- Boeije, G.M., Wagner, J-O., Koormann, F., Vanrollegheem, P.A., Schowanek, D. & Feijt, T.C.J. (2000). PEC calculations based on spatial aggregation of local predicted concentrations. *Chemosphere*, 40, 255-265.
- Boeije, G. (1999). Chemical fate prediction methods for use in geo-referenced environmental exposure assessment. Doctoraatswerk, Universiteit Gent, Faculteit Landbouwkundige en Toegepaste Biologische Wetenschappen.
- Direction des eaux de surface. (1997). Réseau de mesure de la qualité des eaux de surface en Wallonie. Namur.
- ECETOC. (1999). Persoonlijke communicatie.
- Feijt, T., Boeije, G., Matthies, M., Young, A., Morris, G., Gandolfi, C., Hansen, B., Fox, K., Holt, M., Koch, V., Schröder, R., Cassini, G., Schowanek, D., Roseblom, J. & Niessen, H. (1997). Development of a geography-referenced regional exposure assessment tool for European rivers - GREAT-ER. *Chemosphere*, 34(11), 2351-2373.
- Feijt, T.C.J. & Van De Plassche, E.J. (1995). Environmental risk characterization of 4 major surfactants used in the Netherlands. RIVM Rapport 679101025. 87p.
- Fox, K.K., Holt, M.S., Daniel, M., Buckland, H. & Guymer, I. (1999a). Removal of Linear Alkylbenzene Sulphonate from a Small Yorkshire Stream. Contribution to GREAT-ER # 7. Science of the Total Environment, in druk.

- Fox, K.K., Holt, M., Daniel, M., Gandolfi, C., Buckland, H. & Guymier, I. (1999b). Removal of LAS from four rivers - determination of removal rate for the GREAT-ER project. Proc. 9th Annual Meeting of SETAC Europe, LEIPZIG 1999, Germany.
- Hennes, E.C. & Rapaport, R.A. (1989). Calculation and analytical verification of LAS concentrations in surface waters, sediment and soil. *Tenside Surfactants Detergents*, 26, 141-147.
- Holt, M.S., Fox, K.K., Burford, M., Daniel, M., & Buckland, H. (1998). UK monitoring study on the removal of linear alkylbenzene sulphonate in trickling filter type sewage treatment plants. Contribution to GREAT-ER #2. *Science of the Total Environment* 210/211, 255-269.
- LIFE-programma: beleidsondersteunend systeem voor het beheer van de oppervlaktewateren van het Scheldebekken. (1996). Eindrapport.
- Agence de l'eau Artois - Picardie, Ministère de la région wallonne, Vlaamse Milieu-maatschappij. 97 p.
- Mackay, D. (1991). Multimedia environmental models, the fugacity approach. Lewis publishers. Chelsea, USA. ISBN 0-87371-242-0.
- Schowaneck, D., Fox, K., Holt, M., Schröder, F.R., Koch, V., Cassani, G., Matthies, M., Boeije, G., Vanrolleghem, P., Young, A., Morris, G., Gandolfi, C. & Feijtel, T.C.J. (in druk) GREAT-ER: a new tool for management and risk assessment of chemicals in river basins. Contribution to GREAT-ER #10. Opgestuurd naar het IWA congress Paris 2000.
- Schulze, C., Matthies, M., Trapp, S. and Schröder, F.R. (1998). Geography referenced fate modelling of LAS in the stream Itter. Thesis Institute of Environmental Systems Research, University of Osnabrück, Germany.
- Verdonck, F. (1999). Toepassing van een geografisch gerefereerd regionaal blootstellingsmodel voor chemicaliën op het Rupelstroombekken. Master's thesis, Universiteit Gent, Faculteit Landbouwkundige en Toegepaste Biologische Wetenschappen.
- VMM. (1996). Waterkwaliteit. Jaarverslag meetnet oppervlaktewater, Erembodegem, Vlaamse Milieumaatschappij. 181p.
- VMM. (1997). Waterkwaliteit. Lozingen in het water. Jaarverlag, Erembodegem, Vlaamse Milieumaatschappij. 86p.
- Whelan, M.J., Gandolfi, C. and Bischetti, G.B. A simple stochastic model of point source solute transport in rivers based on gauging station data with implication for sampling requirements. Contribution to GREAT-ER #5. *Wat. Res.*, in druk.