

Handleiding voor het gebruik van de passive sampling rekensheet



Handleiding voor het gebruik van de passive sampling rekensheet

Auteur(s)

Petra Krystek

Kees Wesdorp

Handleiding voor het gebruik van de passive sampling rekensheet

Opdrachtgever	ILOW
Contactpersoon	de heer dr. H. Zemelink, de heer W. van den Berg

Documentgegevens

Versie	1.0
Datum	28-03-2024
Projectnummer	11210205-000
Document ID	11210205-000-BGS-0003
Pagina's	29
Classificatie	
Status	definitief

Auteur(s)

Petra Krystek	petra.krystek@deltares.nl	Projectleider
Kees Wesdorp	kees.wesdorp@deltares.nl	

Inhoud

1	Inleiding	5
1.1	Gebruikte kleurcodes in de rekensheet	6
2	<i>1_data_in_format: Data invoer voor gebruiker</i>	7
2.1	Het invoeren van data	7
2.1.1	Tabel 1: invoer analyse data	7
2.1.2	Tabel 2. Meta data. Informatie over de genomen monsters/samplers.	9
2.2	Extra informatie over het tabblad	9
3	<i>2_PRC: Berekening van het PRC evenwicht</i>	10
3.1	Stap 1 Ophalen PRCs	10
3.2	Stap 2 Correctie	11
4	<i>3A_Rs_calc_Jflex_MW_RAW. Fitten van model en berekening van bemonsterd volume</i>	13
4.1	Stappenplan: importeren van benodigde informatie	14
4.2	Extra informatie over het tabblad	16
5	<i>3_Rs_calc_Jflex_MW: aanleveren data voor vervolg berekeningen</i>	17
5.1	Stappenplan	17
6	<i>4_Results_SR Berekening vrij opgeloste concentraties (ng/L)</i>	19
6.1	Stappenplan voor berekening	20
6.2	Extra informatie	22
7	<i>Alle_KPW lijst: lijst met stofeigenschappen</i>	23
7.1	Stappenplan	23
7.2	Verkrijgen van benodigde informatie per stof	23
8	<i>PRC_Kpw: lijst met stof eigenschappen voor PRCs</i>	24
9	Referenties	25
10	Appendix A	26

1 Inleiding

Dit document dient als gebruikershandleiding voor de rekensheet

Deltares_passive_sampling_220210.xlm. De rekensheet is bedoeld om de stofwaarden verkregen van uitgehangen passive samplers om te rekenen tot vrij opgeloste concentraties van de stoffen (organische microverontreinigingen) in het water waar de samplers zijn uitgehangen. Deze handleiding beschrijft hoe deze rekensheet gebruikt dient te worden, dat wil zeggen van correcte data-invoer tot en met het eindresultaat - de tabel met vrije opgeloste stofconcentraties per monster. Er wordt in dit document niet verder ingegaan op de wetenschappelijke achtergrond van passive sampling en de onderliggende berekeningen in de rekensheet. Een uitgebreide inhoudelijke Nederlandse uitleg over het passive sampling wordt o.a. gegeven in Smedes, 2010.

Per tabblad wordt er uitgelegd waar en welke aanpassingen u kunt maken om uw data te verwerken.







De excelsheet bestaat uit de volgende acht tabbladen:

- Het tabblad **0_Lees_mij**: Algemene informatie over de rekensheet
- **1_data_in_format**: import locatie waar de data inclusief meta data moet worden ingevoerd.
- **2_PRC**: Hier worden de analysegegevens van de Performance Reference Components (PRC's) opgehaald vanuit het tabblad *1_data_in_format*, omgerekend naar fractie + correctie voor gewicht van sampler, incl. ruimte voor correctie voor afwijkende recovery
- **3a_Rs_calc_Jflex_MW_RAW**: In dit tabblad wordt het bemonsterd watervolume berekend aan de hand van het fitten van een R_s model (*Rusina et al. 2010*) met behulp van de excel Solver addin
- **3_RS_calc_Jflex_MW**: Nadat men de tevreden is over de fit van het model en nadat er eventuele aanpassingen (weglaten van bepaalde data) zijn gemaakt in het bovenstaande tabblad, kan de data naar het huidige tabblad worden gekopieerd voor verdere verwerking in tabblad 4.
- **4_Results_SR**: Het resultaten tabblad. In dit tabblad wordt met behulp van de eerder verkregen parameters (waaronder sample volume, de bemonsteringsduur en het gewicht van de sampler) de vrij opgeloste concentraties in ng/L berekend voor de aangetroffen stoffen op de samplers. Ook wordt per stof, afhankelijk van het evenwicht, de relevante sample duur weergegeven in de vorm van een Time Weighted Average (TWA) periode in dagen.
- **5_Final_results**: Dit tabblad dient als eind resultaat. In het tabblad worden de eerdere resultaten van *4_Results_SR* gekopieerd als platte waarden. Hierdoor kunt u dus makkelijk gegevens aanpassen, kolommen sorteren of formats aanpassen zonder dat u bang hoeft te zijn dat onderliggende formules worden gebroken.
- **PRC_Kpw**: Lijst met gegevens van de performance reference compounds (PRCs). Bevat onder andere de CAS nummers, moleculair gewicht, Kpws en log Kows. Deze informatie wordt gebruikt in de berekeningen op de eerder genoemde tabbladen.
- **Alle_Kpw**: Lijst met gegevens van alle stoffen (inclusief PRCs). Bevat onder andere de CAS nummers, aquokit naam, moleculair gewicht, Kpws en log Kows. Als een geanalyseerde stof niet in deze tabel staat, dan moet deze eerst worden toegevoegd voordat een concentratieberekening voor de desbetreffende stof kan worden uitgevoerd.

In de onderstaande hoofdstukken wordt per tabblad uitgelegd hoe deze gebruikt dienen te worden.

1.1 Gebruikte kleurcodes in de rekensheet

In de rekensheet worden voor verschillende cellen, verschillende kleuren gebruikt om dingen weer te geven. Afhankelijk van de kleur kan de gebruiker weten wat hij/zij wel of niet met de cel kan doen. Hieronder staat het overzicht van de gebruikte kleuren weergegeven.

	Dit zijn headers van tabellen.
	Dit zijn ook headers van tabellen, maar geven uitleg als men op de cel klikt.
	Bevatten formules, deze cellen mogen niet worden aangepast; <i>opmerking: onderliggende berekening zal beveiligd worden</i>
	Hier kan data worden ingevuld en worden aangepast door de gebruiker
	Cellen met dikke rand, betekent dat de gebruiker hier waarden kan aanpassen a.d.h.v een keuze menu
	Parameters voor het fitting model. Mogen niet worden aangepast.

2 1_data_in_format. Data invoer voor gebruiker

Zorg ervoor dat u de rekensheet onder een andere naam opslaat voordat u verder gaat met het maken van aanpassingen.

2.1 Het invoeren van data

Dit tabblad bestaat uit twee tabellen. Een tabel met de meetwaarden en een meta tabel met informatie over de sampler.

Zorg dat de ruwe data in het onderstaande format komt te staan (A4-F70000) waarmee de excel-sheet verder zal rekenen (max 10000 rijen)
Een CAS-nummer en MonsterID per stof is noodzakelijk om verder te gaan met berekeningen

Monster	CAS-nummer	Stofnaam	Waarde (ng/sampl)	Detectielimiet	CAS-och
IS2456-01	97-32-9	isooctheen	134.26		93329
IS2456-01	238-88-8	isooctylalcohol	55.80		293968
IS2456-01	368-08-2	indin	1.00	c	399002
IS2456-01	120-12-7	isotriecoon	145.89		120127
IS2456-01	150994-44-8	RDE-100	0.93		1596408
IS2456-01	68831-43-2	RDE-105	0.70		68831432
IS2456-01	207122-35-4	RDE-104	0.69		2107E468
IS2456-01	207122-36-5	RDE-103	0.23		2107E468
IS2456-01	1163-18-6	RDE-203	5.00	c	1163186
IS2456-01	41309-18-4	RDE-09	0.30		41309186
IS2456-01	5438-43-1	RDE-47	2.27		5438431
IS2456-01	60349-68-9	RDE-93	4.75		60349609
IS2456-01	55-25-3	bis(2-ethylhexoos)	255.47		65953
IS2456-01	50-32-8	bis(2-ethylpantoon)	76.55		50328
IS2456-01	205-35-2	bis(2-ethylterecina)	84.13		205352
IS2456-01	159-36-3	bis(2-ethylterecina)	43.27		159363
IS2456-01	207-68-9	bis(2-ethylterecina)	83.12		207089
IS2456-01	1438-40-7	bis(2-ethylterecina)	1.00		1438017
IS2456-01	1903-71-9	bis(2-ethylterecina)	0.50	c	1903719
IS2456-01	1903-74-2	bis(2-ethylterecina)	0.88		1903742
IS2456-01	219-01-9	bis(2-ethylterecina)	382.50		219019
IS2456-01	51-18-0	DCO-og	2.13		51180
IS2456-01	72-54-9	DCDD-og		28.51	72548
IS2456-01	2424-822-6	DCDF-og	0.51		2424826
IS2456-01	72-55-9	DCDE-p-p	18.30		72559
IS2456-01	718-02-6	DOF-og	0.23		718026
IS2456-01	51-25-3	DOF-p-p	1.59		51253
IS2456-01	51-70-3	di(2-ethylhexoos)	11.26		51703
IS2456-01	115-32-2	diethyl	122.43		115322
IS2456-01	151-57-1	diethyl	18.01		151571
IS2456-01	18395-93-4	indonifruil (di)	5.00	c	18395938
IS2456-01	131213-05-3	indonifruil (di)	5.00	c	131213053
IS2456-01	1051-37-9	indonifruil (di)	2.00	c	1051379
IS2456-01	72-20-8	indin	5.00	c	72208
IS2456-01	185-03-9	isocroon	53.35		185039
IS2456-01	206-44-9	isocroon	4478.00		206440
IS2456-01	86-73-7	isocroon	88.52		86737
IS2456-01	131-84-6	ICHN-ats	0.73		131846
IS2456-01	138-88-7	ICHN-ats	0.10	c	138827
IS2456-01	138-88-8	ICHN-ats			138888
IS2456-01	158-39-3	ICHN-ats (di-dim)	2.41		158393
IS2456-01	76-44-9	lygylololol	0.10	c	76448

Nummer	Monsternummer	Monsternummer	Extra_info	Accumulatie periode	massa blad (g)	PHC Referentie	M	Bianco correctie	M
1	IS2456-01	8-2-2022	Den Haag	160	19.56				
2	IS2456-02	8-2-2022	Apeldoorn	160	19.3				
3	IS2456-03	8-2-2022	Utrecht	160	21.06				
4	IS2456-04	8-2-2022	Maartricht	160	20.16				
5	IS2456-05	8-2-2022	Groningen	160	19.14				
6	IS2456-06	8-2-2022	Amstelveen	155	19.7				
7	IS2456-07	8-2-2022	Deventer	155	19.32				
8	IS2456-08	8-2-2022	Haarlem	155	19.51				
9	IS2456-09	8-2-2022	Leeuwarden	155	20.54				
10	IS2456-10	8-2-2022	Wierdenbosse	155	16.31				
11	Solvent blank								Ja
12	Referentie 1				19.78	Ja			
13									
14									
15									
16									
17									
18									
19									
20									
21									
22									

Figuur 1 Overzicht van het tabblad: 1_data_in_format

2.1.1 Tabel 1: invoer analyse data

De eerste tabel dient de ruwe sampledata te bevatten met CAS-nummers, monsterID (sampleID), stofnaam, gemeten waarde (ng/sampler) en of deze waarde het detectielimiet betreft. Deze moeten worden geplaatst in een "database" format. Dat wil zeggen per monsterID (of sampler) moeten de geanalyseerde stoffen onder elkaar in rijen worden weergegeven, zie Figuur 2. In 10 wordt uitgelegd hoe je een tabel waarin de monsterIDs als kolommen kunt draaien tot dit format met behulp van de Excel power query. Deze is vanaf Excel versie 2016 automatisch ingebouwd, voor de versies 2013 en lager kan het als add-in worden gedownload.

De tabel heeft de volgende kolommen die ingevuld kunnen worden:

- **MonsterID:** Bevat de unieke naam van het monsters/samplers die geanalyseerd zijn. Meer meta informatie per monster kan worden ingevuld in de metadata tabel. Veld dient als tekst-format te worden ingevuld. Bij wisselende formats (bijv. combinatie van tekst en later nummers) kunnen er anders verderop in de excelsheet problemen ontstaan met de Look-up functies.
- **CAS-nummer:** CAS-nummer van de gemeten stof.
- **Stofnaam (optioneel):** In principe volstaat het CAS-nummer veld om de analyses uit te voeren, maar dit veld kan gebruikt worden om een stofnaam in te vullen zoals hij bij u bekend is. De rekensheet gebruikt naast de hier ingevulde stofnaam ook de

Aquokit stofnaam als deze bekend is (te vinden in het tabblad *Alle_KPW*)

- **Waarde (ng/sampler):** De gemeten aangetroffen hoeveelheid van de stof op de sampler.
 - o **Let op:** De eenheid moet ng/sampler zijn om de berekeningen te laten kloppen!
- **Detectielimiet (<), (optioneel):** Vul hier het "<" teken in als de waarde bij de kolom E: "Waarde (ng/sampler)" het detectielimiet betreft en niet een meting, zie Figuur 2. **Let op,** hier mag alleen het "<" teken worden ingevuld en geen andere tekens/waarden.

Voorwaarde:

- De combinatie van MonsterID en CAS-nummer **moet uniek zijn.**
- Een CAS-nummer en MonsterID per gemeten waarde is noodzakelijk om verder te gaan in de berekening. Stoffen zonder CAS-nummer worden niet verder meegenomen.
- De kolom CAS-short wordt automatisch gegenereerd a.d.h.v. het ingevulde CAS-nummer en hoeft niet te worden aangepast. CAS-short is niks anders dan het CAS-nummer zonder – tekens, zodat de rekensheet makkelijker met de data om kan gaan.
- De MonsterID kolom moet het format tekst hebben.

Zorg dat de ruwe data in het onderstaande format komt te staan (A4:F10000) waarmee de excelsheet verder zal rekenen (max 10000 rijen) Een CAS-nummer en MonsterID per stof is noodzakelijk om verder te gaan met berekeningen

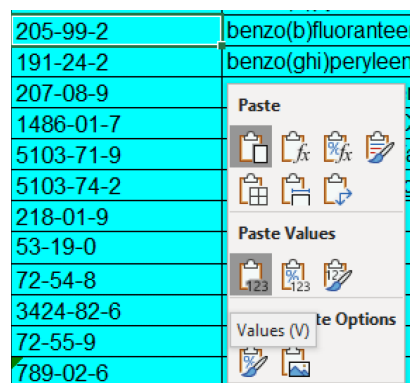
MonsterID	CAS-nummer	Stofnaam	Waarde (ng/sampler)	Detectielimiet (<)	CAS-short
123456-01	83-32-9	acenaftien	134.26		83329
123456-01	208-96-8	acenaftyleen	58.80		208968
123456-01	309-00-2	aldrin	1.00	<	309002
123456-01	120-12-7	antraceen	145.89		120127
123456-01	189094-64-8	BDE-100	0.99		189094648
123456-01	68631-49-2	BDE-153	0.70		68631492
123456-01	207122-15-4	BDE-154	0.60		207122154
123456-01	207122-16-5	BDE-183	0.26		207122165
123456-01	1163-19-5	BDE-209	5.00	<	1163195

Figuur 2. Voorbeeld van data in de invoer tabel. In dit geval betreffen de waarden van aldrin en BDE-209 voor het monsters "123456-01" het detectielimiet. Dit is aangegeven met "<" in de kolom Detectielimiet (<).

Let op: Als u gegevens in deze tabel kopieert vanaf uw eigen database/excelsheet, zorg dan dat u de data als waarden (paste as values) plakt. Dit zorgt ervoor dat de celformaat van de data niet veranderd wat de kans op een niet functionerende rekensheet verkleind.

Het kopiëren van alleen de waarden (zonder format) kan op twee manieren:

- via cntrl + alt + v en dan nog een keer v.
- rechtermuis en dan "paste as values" selecteren:



2.1.2 Tabel 2. Meta data. Informatie over de genomen monsters/samplers.

Deze tabel bevindt zich rechts naast tabel 1 (ook in tabblad *1_Data_in_format*) en hier kan informatie over de monsters die genomen zijn (d.w.z. de uitgehangen samplers) worden ingevuld.

Dit betreft de volgende kolommen:

- **MonsterID:** Naam van het monster of een monstercode. Moet uniek zijn.
- **Monsterdatum:** Optioneel. Datum van het uithangen.
- **Extra_info:** Optioneel. Extra omschrijving van het monster, bijvoorbeeld een locatie of periode 1 t.o.v. periode 2.
- **Accumulatie periode (d):** De accumulatie periode in dagen van de uitgehangen sampler.
- **Massa blad (g):** Het gewicht van de sampler in gram.
- **PRC Referentie. Max 2:** Hier kan worden aangegeven of u wilt dat deze sampler wordt als referentie voor de Performance Reference Compounds (PRCs) berekening. Hier kunnen **maximaal 2** referenties voor worden gebruikt. Meer referenties zullen door de rekensheet worden genegeerd.
- **Blanco correctie Max 1:** Maximaal 1 sampler. Dit is de sampler die verderop in de rekensheet (bij tabblad *4_results_SR*) gebruikt wordt als blanco correctie bij het berekenen van de vrij opgeloste concentraties. Hier kan een veld of lab blanco voor worden gebruikt. Let op deze sampler mag ook dienen als PRC referentie, zie Figuur 3.

Als allebei de tabellen zijn ingevuld kunt u door gaan naar het volgende tabblad: *2_PRC*.

Maximaal 20 monsters en 2 referenties Meta informatie per MonsterID							
Nummer	MonsterID	Monsterdatum	Extra_info	Accumulatie periode (d)	massa blad (g)	PRC Referentie. Max 2	Blanco correctie. Max 1
1	123456-01	9-2-2022	Den Haag	60	19.56		
2	123456-02	9-2-2022	Assen	60	19.8		
3	123456-03	9-2-2022	Utrecht	60	21.05		
4	123456-04	9-2-2022	Maastricht	60	20.15		
5	123456-05	9-2-2022	Groningen	60	20.34		
6	123456-06	9-2-2022	Arnhem	55	19.7		
7	123456-07	9-2-2022	Zwolle	55	19.02		
8	123456-08	9-2-2022	Haarlem	55	19.51		
9	123456-09	9-2-2022	Leeuwarden	55	20.54		
10	123456-10	9-2-2022	s Hertogenbosch	55	18.31		
11	Solvent blank		-		18.38	Ja	Ja
12	Reference 1		-		19.79	Ja	
13							
14							
15							
16							
17							
18							
19							
20							
21							
22							

Figuur 3. Ingevulde meta data tabel. Let op een PRC referentie mag ook dienen als Blanco correctie.

2.2 Extra informatie over het tabblad

Naast deze twee tabellen, zit er ook een zogenaamde helper tabel in de kolommen U:Y. Deze tabel sorteert de aangegeven referenties en blanco. De kolommen zijn verborgen voor de gebruiker en dienen niet te worden aangepast, maar kunnen zichtbaar worden gemaakt via unhide columns (cntrl + shift + 0).

CAS-short	Naam
1486017	BiP-D10
2051607	PCB001
2051618	PCB002
2051629	PCB003
33146451	PCB010
34883415	PCB014
35693926	PCB030
62796650	PCB050
55702460	PCB021
56558168	PCB104
74338242	PCB055
70362491	PCB078
74472405	PCB145
74472529	PCB204

Figuur 5. De velden A11:A25 van tabblad "2_PRC". Hierin kunnen in de lichtblauwe velden CAS-nummers worden aangepast om andere PRCs als referentie te gebruiken.

De in Figuur 5 weergegeven PRCs zijn als standaard ingevuld in de rekensheet. Mocht u een andere PRC willen gebruiken, dan kunt u een ander CAS-short nummer invullen. Dit is het CAS-nummer van de stof, maar dan zonder de "-". Deze nummers kunt u vinden in het tabblad *PRC_Kpw*.

Staat het nummer nog niet in het tabblad *PRC_Kpw*, dan moet u deze eerst in die tabblad toevoegen voordat u het CAS-short nummer in het tabblad *2_PRC* kunt invullen, zie hoofdstuk 7 en 8 voor extra informatie.

3.2 Stap 2 Correctie

Indien het noodzakelijk is, kunt u in de onderste tabel van het tabblad het aantal PRCs aangeven waarover een recovery correctie uitgevoerd kan worden. Bijvoorbeeld wanneer de relatieve concentraties van stoffen met hoge hydrofobiciteit uiteindelijk onder of zelfs boven de 1 zitten, wat niet zou moeten omdat deze stoffen helemaal niet naar de waterfase gaan tijdens de blootstelling. Een mogelijke oorzaak wordt gegeven in Smedes (2010):

"In principe zou de Nt gelijk moeten zijn aan NO voor stoffen die op basis van hun hoge hydrofobiciteit helemaal niet naar de waterfase gaan tijdens de blootstelling. In de praktijk verschillen Nt en NO dan nog wel eens. Meestal is de afwijking klein en voor een enkele stof niet significant (valt binnen de analysespreiding), maar als het voor meerdere stoffen optreedt, kan een correctie wenselijk zijn. Oorzaken van de verschillen kunnen liggen in een klein verschil in sorptiecapaciteit van de sampler of in matrixinvloeden op het signaal. Correctie kan worden uitgevoerd door de fe-waarden te delen door de fe (of het gemiddelde van meerdere) van sterk hydrofobe stoffen. De Kpw-waarden van die sterk hydrofobe stoffen moeten dan wel ongeveer 1,5 logeenheid hoger zijn dan de Kpw-waardewaarbij de curve het $f_c=0.5$ doorsnijdt. De sterk hydrofobe stoffen worden zo, net als interne standaarden in een analytisch proces, als ankerpunt gebruikt."

U kunt het aantal PRCs van onderaan de tabel naar boven geteld aangeven via het lichtblauwe veld H45, zie Figuur 6. Bij de waarde 0 wordt er geen correctie uitgevoerd en zijn de waarde gelijk aan die van tabel 3.

Correctie afwijkende recovery

Aantal PRCs geteld van onderen waarover de correctie wordt toegepast:

2

CAS-short Naam	Referenties									
	Reference 1	123456-01	123456-02	123456-03	123456-04	123456-05	123456-06	123456-07	123456-08	123456-09
1486017 BiP-D10	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2051607 PCB001	1.00	0.02	0.07	0.03	0.03	0.03	0.05	0.01	0.02	0.07
2051618 PCB002	1.00	0.04	0.14	0.07	0.07	0.07	0.09	0.03	0.04	0.14
2051629 PCB003	1.00	0.03	0.12	0.05	0.05	0.05	0.08	0.03	0.03	0.12
33146451 PCB010	1.00	0.42	0.26	0.49	0.49	0.38	0.38	0.43	0.17	0.34
34883415 PCB014	1.00	1.05	1.22	1.44	1.44	0.69	1.33	1.45	1.04	1.09
35693926 PCB030	1.00	0.83	0.70	0.87	0.87	0.78	0.81	0.83	0.70	0.80
62796650 PCB050	1.00	0.80	0.78	0.88	0.88	0.85	0.79	0.86	0.78	0.88
55702460 PCB021	1.00	0.70	0.71	0.82	0.82	0.57	0.76	0.77	0.60	0.68
56558168 PCB104	1.00	0.89	0.87	0.90	0.90	0.88	0.87	0.87	0.84	0.89
74338242 PCB055	1.00	0.90	0.89	0.96	0.96	0.87	0.92	0.90	0.81	0.89
70362491 PCB078	1.00	0.93	0.89	0.93	0.93	0.89	0.94	0.85	0.88	0.89
74472405 PCB145	1.00	0.91	0.92	0.92	0.92	0.91	0.92	0.91	0.90	0.91
74472529 PCB204	1.00	1.09	1.08	1.08	1.08	1.09	1.08	1.09	1.10	1.09

Hier kan het aantal PRCs geteld van onderen worden ingevoerd waarover gemiddeld kan worden. Dit moet een getal tussen 0 en 14 zijn.

Figuur 6: Overzicht van de laatste tabel in het tabblad 2_PRC.

Indien de data akkoord zijn, kunt u door gaan naar de tabblad 3, 3A_Rs calc_Jflex_MW_RAW waar een model op de PRC waarden wordt gefit.

3A_Rs_calc_Jflex_MW_RAW. Fitten van model en berekening van bemonsterd volume

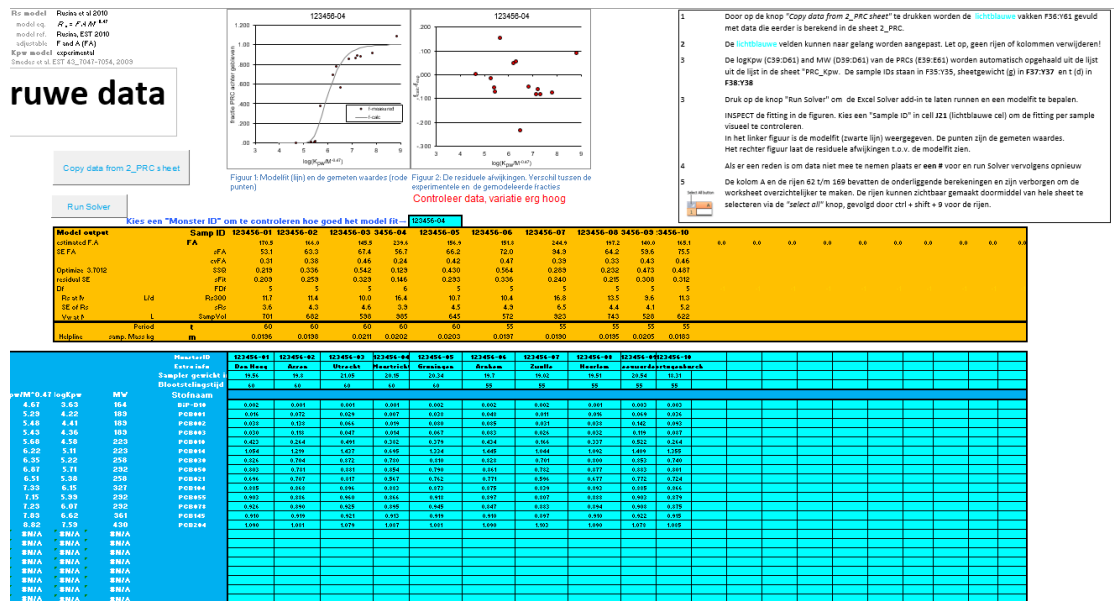
In dit tabblad wordt het fitting model (*Rusina et al. 2010*) toegepast op de eerder berekende relatieve PRC waarden. Dit wordt gebruikt om vervolgens een benadering voor de parameters FA (flow factor * oppervlakte[m²]), de bemonsteringsnelheid (R_s in L d⁻¹) en Sampled volumes (L) te berekenen.

Het tabblad bestaat uit 2 tabellen en 2 figuren en 2 knoppen, zie Figuur 7.

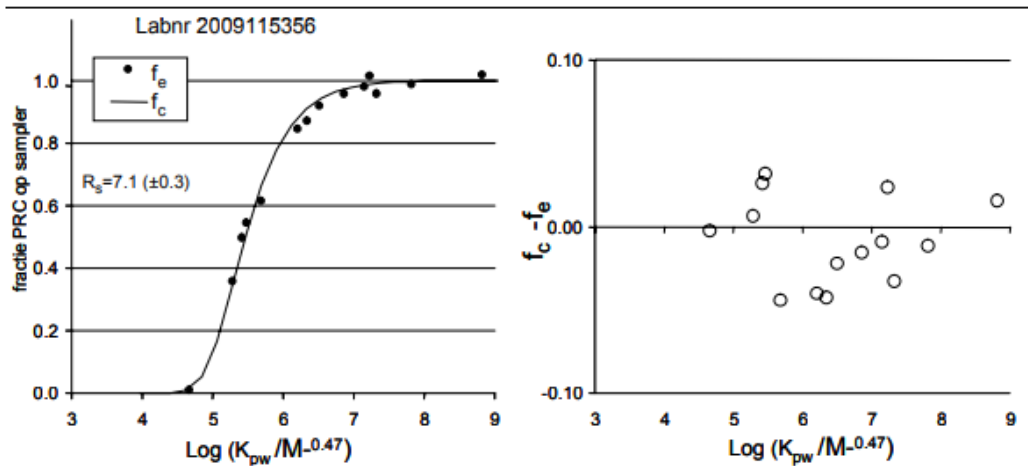
- De onderste tabel (met lichtblauwe velden) moet informatie bevatten uit de eerdere berekeningen van de tabbladen 1_data_in_format en 2_PRCs.
- De oranje tabel bevat de waarden van het model en berekening van parameters die nodig zijn voor de vervolg berekeningen in tabblad 4 Results_SR.

De twee figuren bovenaan het tabblad laten, nadat het model gerunt heeft, zien hoe goed de fitting van het model is t.o.v. van de gemeten waarden. Een voorbeeld van een nette fitting is weergegeven in Figuur 8.

Met behulp van de twee knoppen genaamd "Copy data" en "Run Solver" kan informatie in het tabblad worden ingeladen en kan de fitting van het model gerunt worden.



Figuur 7. Overzicht van tabblad "3a_RS_calc_Jflex_MW_RAW"

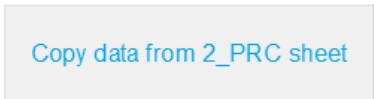


Figuur 4.1 Afgifte van PRC's uitgezet tegen $\log(K_{pw}/M^{-0.47})$ (links). De lijn geeft de model waarden na fitting met FA als variabele. De R_s is weergegeven voor een stof met molgewicht van 300. De figuur rechts geeft de residuale verschillen tussen gemeten en gemodelleerde f-waarden weer.

Figuur 8. Voorbeeld van een nette fitting met relatief kleine verschillen tussen de gemeten en gemodelleerde f waarden. Figuur overgenomen uit Smedes, 2010 pagina 16.

4.1 Stappenplan: importeren van benodigde informatie

- De berekende data van de PRCs en benodigde meta data van de samplers kan worden opgehaald uit het vorige tabblad 2_PRC door op de knop “**Copy data from 2_PRC_sheet**” te drukken.



- De lichtblauwe velden van F35:Y61 zullen worden bevolkt met de bovengenoemde informatie. De informatie hiervan kan naar gelang worden aangepast. **Let op, geen rijen of kolommen verwijderen!** Anders kunnen de onderliggende berekeningen namelijk worden verstoord.
- Het kan zijn dat de solvent blank wordt meegerekend als monster. Dit gebeurt wanneer u in tabblad “1_data_in_format” de solvent blank heeft geselecteerd als blanco correctie, maar niet als PRC referentie. Om te voorkomen dat de blanco verder wordt meegerekend als monster en daarmee dus meegenomen wordt in het fitting model kunt u deze in dit tabblad verwijderen.

- o Dit kan door de monster informatie van de blanco correctie te deleten in de lichtblauwe velden van F35:Y61. **Let op: Voer deze stap uit voordat u de solver knop runt.**

0	0	0	
5	55	55	
5	0.0205	0.0183	0.0184

123456-09	123456-10	Solvent blank	
Leeuwarder	tertogenbos	-	
20.54	18.31	18.38	
55	55		
0.003	0.003		
0.075	0.039		

- Vervolgens kunt u op de “**Run Solver**” knop drukken om de Excel Solver add-in te laten runnen. Deze zal de waarden van FA gaan schatten om tot een zo goed mogelijke fit te komen.

Run Solver

- o De solver knop zorgt bij het opstarten van de rekensheet dat de benodigde solver add-in voor u wordt geïnstalleerd als deze nog niet was geïnstalleerd. Hierdoor kunt u meteen de solver runnen. Indien de solver add-in niet vooraf was geïnstalleerd, dan wordt deze ook weer gedeïnstalleerd bij het sluiten van het bestand.
- o Mocht het nu zijn dat de knop niet werkt dan kunt u handmatig de addin installeren en runnen via de volgende stappen (afkomstig uit : [Load the Solver Add-in in Excel \(microsoft.com\)](https://support.office.com/en-us/article/load-the-solver-add-in-in-excel))
 - File > Options
 - Click Add-Ins, and then in the Manage box, select Excel Add-ins.
 - Click Go.
 - In the Add-Ins available box, select the Solver Add-in check box, and then click OK.
 - Notes: If the Solver Add-in is not listed in the Add-Ins available box, click Browse to locate the add-in.
 - If you get prompted that the Solver Add-in is not currently installed on your computer, click Yes to install it.
 - After you load the Solver Add-in, the Solver command is available in the Analysis group on the Data tab.
- U kunt de fitting van het model voor de verschillende monsters bekijken via de cel J21

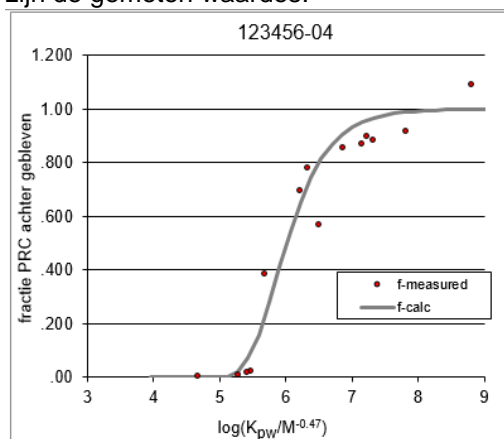
Kies een "Monster ID" om te controleren hoe goed het model fit ->

123456-04

Samp ID	123456-01	123456-02	123456-03	123456-04	123456-05
FA	170.5	166.0	145.5	239.6	123.4
sFA	53.1	63.3	67.4	56.7	45.6
cvFA	0.31	0.38	0.46	0.24	0.35
SSQ	0.219	0.336	0.542	0.129	0.430

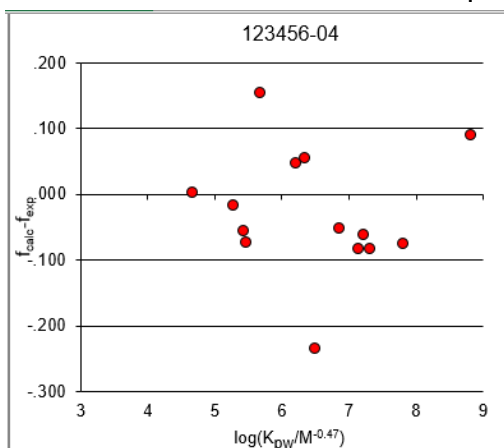
Data voor figuur
Kies hier een monster om in de figuur weer te geven

- o De figuren zullen automatisch mee veranderen naar het geselecteerde monster.
- INSPECT de fitting in de figuren.
 - o In het linker figuur is de modelfit (zwarte lijn) weergegeven. De rode punten zijn de gemeten waardes.



- Het rechter figuur laat de residuele afwijkingen t.o.v. de modelfit zien. Wanneer de afwijkingen van de residuals rondom de fitting erg hoog is (sum of squares > 0.12) wordt dit weergegeven onder dit figuur:

Controleer data, variatie erg hoog



- Als er een reden is om data niet mee te nemen (bijv uitschieters die SSQ erg beïnvloeden) plaats dan een # voor de betreffende waarde in de lichtblauwe velden van F40:Y61. Vergeet niet daarna de Solver opnieuw te runnen.

Als u tevreden bent over de fitting kunt u doorgaan naar het volgende tabblad: 3_RS_calc_Jflex_MW.

4.2 Extra informatie over het tabblad

- De kolom A en de rijen 62 t/m 169 bevatten de onderliggende berekeningen en zijn verborgen om het tabblad overzichtelijker te maken en om de berekeningen tegen niet bedoelde bijstellingen te beveiligen. De rijen kunnen zichtbaar gemaakt doormiddel van het hele tabblad te selecteren via de "select all" knop, gevolgd door ctrl + shift + 9 voor de rijen.



Solvent blank is nu opgenomen en berekend zoals een monster. Dat maakt fcalc #VERW in figuur 1. Dus solvent blank moet er uitgehaald worden, tenzij het de bedoeling is om solvent blank mee te nemen in de berekening.

5 3_Rs_calc_Jflex_MW: aanleveren data voor vervolg berekeningen

Dit tabblad lijkt zeer veel op het voorgaande tabblad en is dan ook bedoeld als tussenstap voor de vervolg berekeningen in het tabblad 4_Results_SR.

Wanneer u tevreden bent met de eerder gemaakte fitting in het voorgaande tabblad, zie 3A_Rs_calc_Jflex_MW_RAW. Fitten van model en berekening van bemonsterd volume, dan kunt u deze informatie hierin kopiëren.

Het kopiëren van de data naar dit tabblad is noodzakelijk omdat de vervolg berekeningen refereren naar de informatie in dit tabblad. Deze tussenstap is toegevoegd om de rekensheet sneller te maken en om te zorgen dat de gebruiker aanpassingen in de gegevens kan maken zonder dat hij/zij zich zorgen hoeft te maken om onderliggende formules te breken.

Dit tabblad bevat 1 knop: Copy raw data sheet 3A, zie Figuur 9.

Re model: **Reinstel 2009**
 model: **K_v-FDM 1.0**
 modelref: **Reinstel 2009**
 afmeting: **FDM(FDM)**
 Reu model: **experimental**
 Scenario: **EST_01_047-104-2009**

Figure 1: Modelli (lijp) van de gemeten waarde (rode punten)

Figure 2: De rotsdiele afwijkingen. Verzchild tussen de experimentele en de gemiddelde fractie

- Dit tabblad dient als tussenstap om de data van het eerdere gefitte model "veilig" te stellen en te mee nemen voor de vervolg berekeningen. Het kopiëren van de data naar deze sheet is dan ook **noodzakelijk** omdat de vervolg berekeningen in het tabblad "4_Results_SR" refereren naar de informatie in deze sheet
- Door op de knop "Copy raw data sheet 3A" te drukken worden de **model** parameters en de **gemiddelde** velden EST_01 gewist met data afkomstig uit het tabblad 3A
- Deze velden kunnen ook hier nog naar gelang worden aangepast. Let op, geen rijen of kolommen verwijderen!
- Deze tussenstap is toegevoegd om de rekensheet sneller te maken.
- Nadat de data correct gekopieerd is kunt u doorgaan naar de resultaten in het volgende tabblad "4_Results_SR".

De kolom A en de rijen 62 t/m 169 bevatten, net als het vorige tabblad, de onderliggende berekeningen en zijn verborgen om de worksheet overzichtelijker te maken. De rijen kunnen zichtbaar gemaakt doormiddel van hele sheet te selecteren via de "select all" knop, gevolgd door ctrl + shift + 9 voor de rijen.

Copy raw data sheet 3A

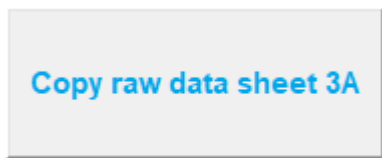
Klik een "Monster ID" om te controleren hoe goed het model fit – 123456-01

Model waargen	Sample ID	123456-01	123456-02	123456-03	123456-04	123456-05	123456-06	123456-07	123456-08	123456-09	123456-10	123456-11	123456-12	123456-13	123456-14	123456-15
afmeting FA	FA	209.3	246.4	197.2	244.1	209.7	202.4	401.3	253.4	177.4	252.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SEFA	afA	80.0	80.0	40.0	30.1	30.0	40.0	80.0	30.0	30.0	30.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
coFA	coFA	0.24	0.21	0.22	0.24	0.19	0.20	0.28	0.21	0.10	0.19					
Optimaleur 0.7745	SFO	0.997	0.844	0.876	0.820	0.861	0.876	0.879	0.867	0.871	0.884					
voelingsDE	afA	0.034	0.030	0.026	0.046	0.031	0.044	0.024	0.036	0.019	0.034					
DF	FDI	5	5	4	4	5	5	5	5	5	5					
React-DC	Rp200	164	16.0	12.0	16.0	164	12.0	12.0	17.4	12.0	17.2					
Stof Fr	stFr	3.8	3.8	2.8	4.0	2.7	2.8	3.1	2.4	2.2	2.3					
UwstMw	UwstMw	112	1000	770	1000	112	770	1000	100	112	100					
Formel	k	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0					
Hulding ramp Maatsk	m	0.0194	0.0191	0.0211	0.0202	0.0197	0.0199	0.0195	0.0205	0.0195	0.0192					

Figuur 9. Overzicht van het tabblad "3_Rs_calc_Jflex_MW"

5.1 Stappenplan

- Importeer de data uit het voorgaande tabblad met de knop "Copy raw data sheet 3A"



- Als alles goed gaat, zullen de velden van C22:Y61 worden bevolkt met de data uit het voorgaande tabblad.
 - o De knop kopieert alleen waarden, dus de onderliggende formules worden niet mee gekopieerd.

- Als de data goed is gekopieerd ,kunt u door gaan naar het volgende tabblad:
4_Results_SR

6 4_Results_SR Berekening vrij opgeloste concentraties (ng/L)

In dit tabblad wordt de vrij opgeloste concentraties (ng/L) berekend van de in tabblad 1 "1_data_in_format" ingevulde stoffen. Dit wordt gedaan aan de hand van de eerder berekende/geschatte parameters uit de tabbladen 2, 3A en 3. Het tabblad werkt van rechts naar links. De hulp tabellen/berekeningen staan rechts en gaan in stappen naar links zodat de eindresultaten aan het begin komen.

Het tabblad bestaat uit 5 tabellen. Van links naar rechts zijn dit:

1. **Gebruikte gegevens uit tabblad "Alle KPW".** (Start in cel A13)
 - a. Dit is een tabel informatie over de stoffen die in het tabblad worden geanalyseerd. De tabel bevat de volgende kolommen de logKpw, MW (molecuul gewicht), K_origin (manier waarop Kpw bepaalt is) en de aquokit stofnaam.

LogKpw	MW	K_origin	Aquokit stofnaam
5.28	257.50	cos	PCB028
5.59	292.00	swWs	PCB052
6.02	326.50	swWs	PCB101
6.20	326.50	SWWs	PCB118
6.69	361.00	swWs	PCB153
6.78	361.00	swWs	PCB138
7.17	395.50	SwWs	PCB180
3.03	128.17	cos	Naftaleen
3.26	152.19	cos	Acenaflyleen
3.62	154.21	cos	acenafteen

2. **Berekende vrij opgeloste concentraties in ng/L** (Start in cel F13)
 - a. Tabel met eindresultaten, waarin de berekende vrij opgeloste concentraties van alle geanalyseerde stoffen (met uitzondering van de PRCs aangegeven in tabblad 2_PRC, A12:A25) worden weergegeven per monster.
 - b. Daarnaast worden boven de tabel ook de meta informatie voor zover ingevuld per monster weergegeven.

		Lijst nr	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
		t	60	60	60	60	60	55	55	55	55	55
		FA	210	245	187	245	210	202	409	253	177	252
		m	0.020	0.020	0.021	0.020	0.020	0.020	0.019	0.020	0.021	0.018
		SampVol	862	1006	770	1006	862	763	1540	955	668	950
		MonsterID	123456-01	123456-02	123456-03	123456-04	123456-05	123456-06	123456-07	123456-08	123456-09	123456-10
		Extra info	Den Haag	Assen	Utrecht	Maastricht	Groningen	Arnhem	Zwolle	Haarlem	Leeuwarden	Hertogen
CAS-short	CAS-nummer	Eigen stofnaam	123456-01	123456-02	123456-03	123456-04	123456-05	123456-06	123456-07	123456-08	123456-09	123456-10
83329	83-32-9	acenafteen	1.6	48.4	21.9	7.3	1.9	0.8	33.03	9.1	11.5	0.7
208968	208-96-8	acenaflyleen	1.7	3.3	3.3	3.2	1.2	1.3	3.5	2.1	3.4	1.3
309002	309-00-2	aldrin	<0.005	<0.005	<0.004	<0.004	<0.004	<0.005	<0.005	<0.005	<0.005	<0.005
120127	120-12-7	antraceen	0.5	1.2	1.3	1.08	0.3	0.4	1.2	0.8	1.4	0.4
189084648	189084-64-8	BDE-100	0.002	0.003	0.007	0.003	0.002	0.002	0.0004	0.001	0.002	0.0007
68631492	68631-49-2	BDE-153	0.001	0.002	0.004	0.003	0.001	0.002	0.0003	0.001	0.002	0.0005
207122154	207122-15-4	BDE-154	0.001	0.001	0.003	0.002	0.001	0.001	0.0003	0.001	0.001	0.0005
207122165	207122-16-5	BDE-183	0.0004	0.0005	0.0008	0.0005	0.0005	0.0006	0.0004	0.0005	0.0006	0.0004
1163195	1163-19-5	BDE-209	<0.01	<0.009	0.2	0.06	<0.01	<0.01	<0.006	<0.009	<0.01	<0.009
41318756	41318-75-6	BDE-28	<0.0001	<0.0001	<0.0002	<0.0001	<0.0001	<0.0002	<0.00008	<0.0001	<0.0002	<0.0001
5436431	5436-43-1	BDE-47	0.004	0.006	0.02	0.008	0.005	0.005	0.0006	0.003	0.004	0.001

3. TWA (Time Weighted Average) periode in dagen (Start in cel A113)

- a. Deze tabel geeft per stof en per monster aan of er een evenwicht is bereikt eerder dan de totale accumulatie periode.

TWA (Time Weighted Average) periode in dagen

CAS-number	Stofnaam (ENG)	23456	023456	023456-023456	023456-023456	023456-023456	023456-023456	023456-023456	023456-023456	023456-023456	
83-32-9	ACE	2.9	2.5	3.5	2.5	3.0	3.0	1.4	2.4	3.6	2.2
208-96-8	ACY	1.3	1.1	1.5	1.1	1.3	1.3	0.6	1.0	1.6	1.0
309-00-2	aldrin	11.7	10.2	14.2	10.4	12.2	12.2	5.9	9.7	14.6	9.1
120-12-7	ANT	12.0	10.4	14.4	10.5	12.4	12.5	6.0	9.9	14.8	9.3
189084-64-8	0	All	All	All	All	All	All	All	All	All	All
68631-49-2	BDE153	All	All	All	All	All	All	All	All	All	All
207122-15-4	BDE154	All	All	All	All	All	All	All	All	All	All
207122-16-5	BDE183	All	All	All	All	All	All	All	All	All	All
1163-19-5	0	All	All	All	All	All	All	All	All	All	All
41318-75-6	BDE28	All	All	All	All	All	All	All	All	All	All
5436-43-1	BDE47	All	All	All	All	All	All	All	All	All	All

4. Gemeten waarden opgehaald uit tabblad 1_data_in_format (Start in cel BK13)

- a. Dit is de tabel die per stof en per monster de gemeten waarden ophaalt uit door u ingevulde tabel 1 van tabblad 1_data_in_format. Vanuit deze tabel worden de andere tabellen berekend

Gemeten waarden opgehaald uit sheet 1_data_in_format

Lijst nr	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
t	60	60	60	60	60	55	55	55	55	55
FA	210	245	187	245	210	202	409	253	177	252
m	0.020	0.020	0.021	0.020	0.020	0.020	0.019	0.020	0.021	0.018
SampVol	862	1006	770	1006	862	763	1540	955	668	950
MonsterID	123456-01	123456-02	123456-03	123456-04	123456-05	123456-06	123456-07	123456-08	123456-09	123456-10
Extra info	Den Haag	Assen	Utrecht	Maastricht	Groningen	Arnhem	Zwolle	Haarlem	Leeuwarden s	Hertogen

CAS-number	Eigen stofnaam	123456-01	123456-02	123456-03	123456-04	123456-05	123456-06	123456-07	123456-08	123456-09	123456-10
83-32-9	acenafteen	134.3	3,995.6	1,918.3	610.8	157.2	64.4	2,618.5	742.9	981.3	50.6
208-96-8	acenaftyleen	58.8	119.6	124.9	118.4	43.0	47.1	121.6	75.2	128.1	43.1
309-00-2	aldrin	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
120-12-7	antraceen	145.9	376.9	419.6	344.1	106.2	123.8	370.6	234.5	415.9	114.2
189084-64-8	BDE-100	1.0	1.9	3.8	2.4	1.0	1.3	0.4	1.0	1.0	0.5
68631-49-2	BDE-153	0.7	1.2	2.3	1.9	0.7	0.9	0.3	0.7	0.8	0.4
207122-15-4	BDE-154	0.6	1.0	1.9	1.4	0.6	0.8	0.3	0.6	0.6	0.3
207122-16-5	BDE-183	0.3	0.3	0.4	0.3	0.3	0.3	0.4	0.3	0.3	0.3
1163-19-5	BDE-209	5.0	5.0	70.9	35.7	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0
41318-75-6	BDE-28	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
5436-43-1	BDE-47	2.7	5.0	11.3	6.5	3.2	3.2	0.7	2.5	2.3	1.0

5. Waarden uit tabblad 1_data_in_format die het detectielimiet betreffen. (Start in cel CN13)

- a. Dit is een hulp tabel die per stof en per monster kijkt of de opgehaalde waarden van de bovenstaande tabel het detectielimiet betreft of niet.

Waarden uit sheet "data_in_format" die het detectielimiet betreffen worden weergegeven met <

CAS-num	Aquokit	123456-01	123456-02	123456-03	123456-04	123456-05	123456-06	123456-07	123456-08	123456-09	123456-10
83-32-9	ACE	<	<	<	<	<	<	<	<	<	<
208-96-8	ACY	<	<	<	<	<	<	<	<	<	<
309-00-2	aldrin	<	<	<	<	<	<	<	<	<	<
120-12-7	ANT	<	<	<	<	<	<	<	<	<	<
189084-64-8	0	<	<	<	<	<	<	<	<	<	<
68631-49-2	BDE153	<	<	<	<	<	<	<	<	<	<
207122-15-4	BDE154	<	<	<	<	<	<	<	<	<	<
207122-16-5	BDE183	<	<	<	<	<	<	<	<	<	<
1163-19-5	0	<	<	<	<	<	<	<	<	<	<
41318-75-6	BDE28	<	<	<	<	<	<	<	<	<	<
5436-43-1	BDE47	<	<	<	<	<	<	<	<	<	<

6.1 Stappenplan voor berekening

- Druk op de knop "Importeer stoffen uit data_in_format tabblad".



- o De knop zorgt ervoor dat de unieke CAS-short-nummers van kolom F3:F10000 in het tabblad 1_data_in_format, worden opgehaald en geplaatst in de cel F13 t/m Fxxx (het aantal unieke CAS-nummers dat de dataset bevat) van de tabblad 4_Results_SR.

- Een handige controle is om te kijken of dit aantal overeenkomt met het verwachte aantal stofnamen, mogelijk is een CAS nummer niet goed omgezet naar CAS-short nummer.
 - Let op, de gebruikte PRC stoffen van tabblad *2_PRC* (veld A12:A25) worden niet meegenomen.
- Nadat de CAS-short nummers zijn gekopieerd zal de rekensheet automatisch de berekeningen uitvoeren.

- U heeft hierbij de mogelijkheid om bepaalde dingen aan te passen
- **Veld F10:** Het aantal significante decimalen van het eindresultaat

Aantal significante decimalen

- **Veld F11:** Of er een correctie voor sampler gerelateerde achtergrondwaarde moet worden toegepast. Default is ja.

Correctie aan/uit

- Of u het CAS-nummer of CAS-short nummer wilt weergeven in de tabellen en of u de Aquokit stofnamen wilt gebruiken of 1 van de andere mogelijkheden, zoals uw eigen ingevulde stofnamen

- **Veld C113:** Welke van de aangegeven referentie samplers/blanco u wilt gebruiken voor de blanco correctie. Default is de aangegeven blanco correctie

- **Let op!** Om de berekeningen uit te voeren heeft de rekensheet de waarden uit de tabel “*Gebruikte gegevens uit sheet Alle KPW*” (Veld A13:D2000) nodig per cas-nummer. Deze waarden worden opgehaald uit het tabblad *Alle_KPW*.
- **De berekening kan niet worden uitgevoerd voor een stof als:** het betreffende CAS nummer niet in de lijst van *Alle_KPW* staat, of wanneer 1 van de benodigde gegevens niet is ingevuld in de lijst.
 - Dit wordt rij cellen zal dan roze worden gekleurd om aan te geven dat er iets niet in orde is.

5.53	252.31	cos	Benzo(a)pyreen	50328	50-32-8	benzo(a)pyreen	0.094	0.11	0.096	0
			niet in Alle_Kpw lijst	139395	139-39-5	indeno(123-cd)pyreen	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	#
6.17	278.00	cos	Dibenz(a,h)anthraceen	53703	53-70-3	dibenzo(ah)anthraceen	0.014	0.018	0.012	0
			niet in Alle_Kpw lijst	190863	190-86-3	benzo(ghi)peryleen	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	#

- Deze waarden dienen eerst onderin de lijst van *Alle_KPW* te worden ingevuld voordat de berekening kan worden gedaan. Meer informatie hierover in de uitleg van de tabblad *Alle KPW*, hoofdstuk 7.

- Wanneer een berekende vrij opgeloste concentratie (ng/L) het detectielimiet betreft wordt de waarde weergegeven met een kleiner dan “<” teken ervoor. Ook zal de cel geel oplichten zodat de gebruiker makkelijker ziet dat het een detectielimiet betreft.

chloordaan-cis (alfa) <0.0008
chloordaan-trans (gamma) 0.0012

Tot slot

- Als u tevreden bent over de resultaten dan kunt u deze als platte waarden kopiëren naar het tabblad “*5_Final_results*” met behulp van de knop “**Kopieer berekende waarden + format**”. Deze bevindt zich boven de tabel **Berekende vrij opgeloste concentraties in ng/L** (Start in cel F13).
- Alleen de waarden in de tabellen **Berekende vrij opgeloste concentratie** en **TWA in dagen** worden dan gekopieerd. U kunt dus in het tabblad “*5_Final_results*”

aanpassingen maken in de data of kolommen sorteren op, bijvoorbeeld, stofnaam zonder dat u bang hoeft te zijn om onderliggende formules te breken.

Kopieer berekende waarden + format

Berekende vrij opgeloste concentraties in ng/L

Lijst nr	1	2	3	4
t	60	60	60	60
FA	155	148	132	205
m	0.020	0.020	0.021	0.020
SampVol	636	607	542	842
MonsterID	123456-01	123456-02	123456-03	123456-04
Extra info	Den Haag	Assen	Utrecht	Maastricht

6.2 Extra informatie

Het tabblad "4_Results_SR" is gebaseerd op een oudere versie van de rekensheet, die niet het detectielimiet per sampler per monster berekende. Hierdoor staan er ook nog de kolommen C_w uit analytische Detectielimiet en Detectielimiet via productie blanco (respectievelijk AC13:AC2000 en AD13:2000)

Aantal significante decimalen	2
Correctie aan/uit	Aan
Cw uit Anal DL	DL Prod BL
-	-
-	-

Als u gewend bent deze te gebruiken dan kunt u de detectielimieten per stof invullen in de kolom CJ13:CJ2000 genaamd "detectielimiet". Vervolgens zullen de 2 velden worden berekend.

Blanco	detectielimiet	Avg Ref
solvent blank		0.0
		0.0
		0.0
		0.0
		0.0
		0.0
		0.0
		0.0
		0.0
		0.0
		0.0
		0.0
		0.0
		0.0
		0.0
		0.0
		0.0
		0.0
		0.0
		0.0
		0.0

7 Alle_KPW lijst: lijst met stofeigenschappen

Het tabblad waarin de benodigde gegevens in staan van alle voor in de rekensheet bekende stoffen. Dit betreft het CAS-nummer, CAS_short nummer, stofnamen zoals Aquokit, log Kow, K_{pw}, logK_{pw}, qualifer (manier waarop Log Kpw is verkregen), cv Kpw, MW (molecular weight) en referenties.

Figuur 10. Overzicht van tabblad “Alle KPW”

7.1 Stappenplan

Om stoffen toe te kunnen voegen, dient u onderaan de lijst, de nieuwe gegevens in te vullen. Hierbij zijn in ieder geval de volgende velden verplicht (anders kan de berekening niet worden uitgevoerd):

- CAS-nummer
- CAS-nummer short (is CAS nummer zonder “-”). Deze gebruikt de rekensheet om data met elkaar te koppelen.
- LogK_{pw} (passive sampler-water partition coefficients)
- MW (Molecular weight)
- Qualifier
 - o Dit is de manier waarop de logK_{pw} is bepaald. Bijvoorbeeld via de cosolvent model methode voor J-flex of Altesil of als schatting adhv van K_{ow} (octanol-water partition coëfficiënt)

De overige velden zijn niet direct noodzakelijk maar het is bijvoorbeeld voor een zo'n volledig mogelijk beeld. Bijvoorbeeld door de aquokit stofnaam weer te geven en een referentie waar bijvoorbeeld de K_{pw}'s dan wel K_{ow}'s zijn verkregen.

- **Let op!** Voeg de stoffen altijd onderaan de lijst in, achter de laatste rij met gegevens. Laat hierbij geen rijen leeg
- PRCs die gebruikt worden als referentie dienen ook toegevoegd te worden aan het tabblad PRC_KPW.

7.2 Verkrijgen van benodigde informatie per stof

- Als de K_{pw} van een stof niet bepaald is via bijvoorbeeld de cosolvent model methode, dan kan de K_{pw} geschat worden via de K_{ow}. Deze K_{ow} gegevens evenals de MW zijn bijvoorbeeld beschikbaar via bronnen zoals Chemspider/Episuite of de CompTox Chemicals Dashboard ([CompTox Chemicals Dashboard \(epa.gov\)](https://www.epa.gov/comp-tox-chemicals-dashboard))

8 *PRC_Kpw: lijst met stof eigenschappen voor PRCs*

Dit is het tabblad waarin de benodigde gegevens van de performance reference compounds (PRCs) staan die gebruikt worden voor tabblad 2_PRC. De waarden in dit tabblad kunnen op dezelfde manier worden ingevuld als voor het tabblad *Alle KPW*.

9 Referenties

The calculation method using NLS can be referred to as:

Rusina, T.P., Smedes, F., Koblizkova, M., Klanova, J., 2010. Calibration of Silicone Rubber Passive Samplers: Experimental and Modeled Relations between Sampling Rate and Compound Properties. Environ. Sci. Technol. 44, 362-367.

The partition coefficients are referred to as:

Smedes, F., Geertsma, R.W., Zande, T.v.d., Booij, K., 2009. Polymer-Water Partition Coefficients of Hydrophobic Compounds for Passive Sampling: Application of Cosolvent Models for Validation. Environ. Sci. Technol. 43, 7047-7054.

The calculation method using NLS can be referred to as:

Booij, K., Smedes, F., 2010. An Improved Method for Estimating in Situ Sampling Rates of Nonpolar Passive Samplers. Environ. Sci. Technol. 44, 6789-6794.

Uncertainty estimations follow:

Billo, E. J. Non-linear regression using the solver. In Excel for Chemists: A Comprehensive Guide.; John Wiley & Sons, Inc.: 2001, pp 223-238

Rapport met Nederlandse uitleg over de gebruikte passieve sampling berekeningen

Smedes, 2010. Evaluatie van monitoring met passieve sampling Relaties met mosselen, zwevend stof en totaal water. Deltares rapport 1202990-000 in opdracht van Rijkswaterstaat Waterdienst.

Meer informatie over passieve sampling (engels):

(<http://www.foppesdefense.passivesampling.net/foppes%20thesis.pdf>).

10 Appendix A

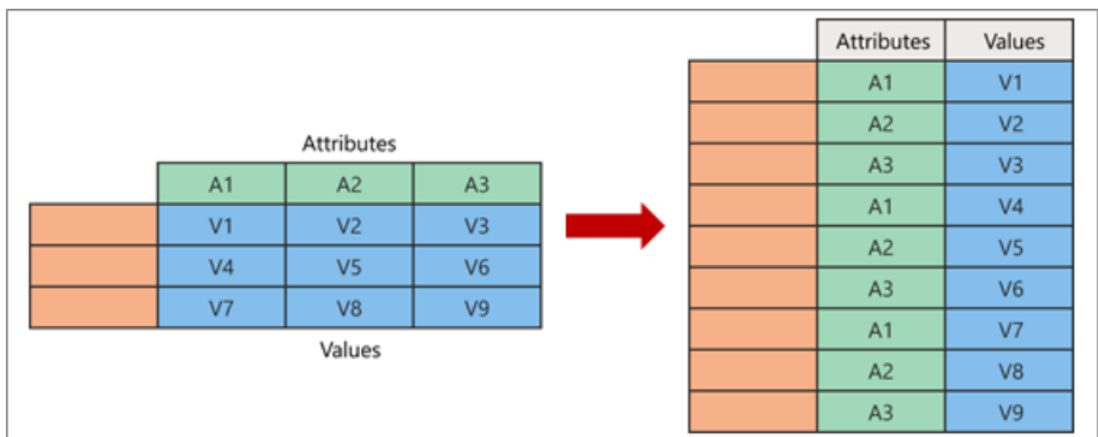
De onderstaande uitleg is afkomstig van de Microsoft website via de link: [Unpivot columns \(Power Query\) \(microsoft.com\)](https://microsoft.com)

Omdat links nogal eens willen breken is worden de stappen hieronder ook weer gegeven. In het onderstaande voorbeeld is ook gebruik gemaakt van [How To Unpivot Data With Power Query | How To Excel](#) om een duidelijker beeld te geven. Mocht de huidige informatie door veroudering niet meer van toepassing zijn dan wordt aangeraden om te googlen op "unpivot using power query excel". Onderstaande tekst is in het engels.

Unpivot columns (Power Query)

Excel voor Microsoft 365 Excel 2021 Excel 2019 Excel 2016 Excel 2013 Excel 2010.

You might want to unpivot data, sometimes called flattening the data, to put it in a matrix format so that all similar values are in one column. This is necessary, for example, to create a chart or a report.



When you unpivot, you unpack the attribute-value pairs that represent an intersection point of the new columns and re-orient them into flattened columns:

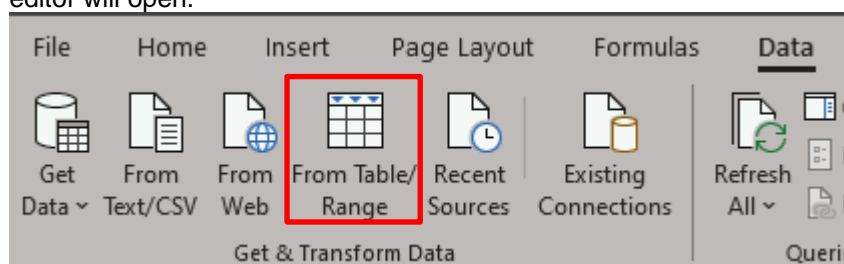
- **Values** (in blue on the left) are unpivoted into a new column (in blue on the right).
- **Attributes** (in green on the left) are unpivoted into a new column (in green on the right) and duplicates are correspondingly mapped to the new Values column.

Unpivot columns

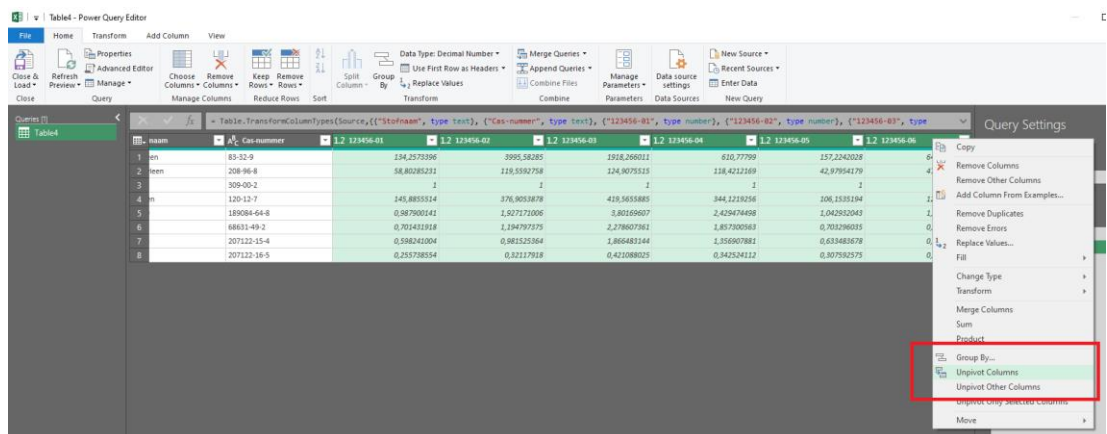
Here is the sample data used in this procedure.

Stofnaam	Cas-nummer	123456-01	123456-02	123456-03	123456-04	123456-05	123456-06
acenaftaan	83-32-9	134.2573396	3995.58285	1918.266011	610.77799	157.2242028	64.43647175
acenaftyleer	208-96-8	58.80285231	119.5592758	124.9075515	118.4212169	42.97954179	47.06315833
aldrin	309-00-2	1	1	1	1	1	1
antraceen	120-12-7	145.8855514	376.9053878	419.5655885	344.1219256	106.1535194	123.7514501
BDE-100	189084-64-8	0.987900141	1.927171006	3.80169607	2.429474498	1.042932043	1.321732487
BDE-153	68631-49-2	0.701431918	1.194797375	2.278607361	1.857300563	0.703296035	0.862134768
BDE-154	207122-15-4	0.598241004	0.981525364	1.866483144	1.356907881	0.633483678	0.762004371
BDE-183	207122-16-5	0.255738554	0.32117918	0.421088025	0.342524112	0.307592575	0.309299257

1. Make sure that the data is a table.
 - a. Select your data.
 - b. Select Home > Format as Table.
2. Select a cell within your data.
3. Go to the **Data** tab in the ribbon and press the **From Table/Range** button. The query editor will open.



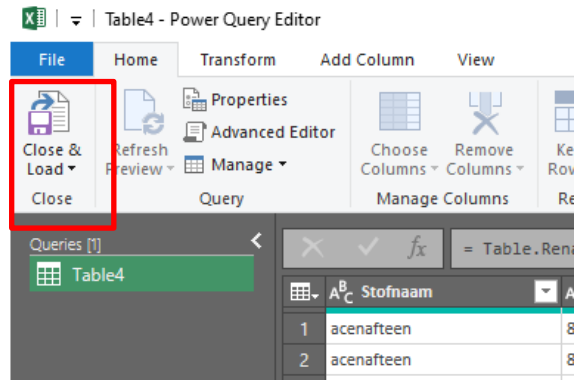
4. Left click on the first column heading. Hold the Shift key. Left click on the last column heading.
5. Right click on any of the selected columns and select Unpivot Only Selected Columns from the menu.



6. The query editor preview will show the unpivoted data. You can rename the columns from the default Attribute and Value to something more relevant with a double left click on the heading. In our case these should be MonsterID Sold and Waarde.

	A ^B _C Stofnaam	A ^B _C Cas-nummer	A ^B _C MonsterID	1.2 Waarde(ng/sampler)
1	acenaftteen	83-32-9	123456-01	134,2573396
2	acenaftteen	83-32-9	123456-02	3995,58285
3	acenaftteen	83-32-9	123456-03	1918,266011
4	acenaftteen	83-32-9	123456-04	610,77799
5	acenaftteen	83-32-9	123456-05	157,2242028
6	acenaftteen	83-32-9	123456-06	64,43647175
7	acenaftyleen	208-96-8	123456-01	58,80285231
8	acenaftyleen	208-96-8	123456-02	119,5592758
9	acenaftyleen	208-96-8	123456-03	124,9075515
10	acenaftyleen	208-96-8	123456-04	118,4212169

- Go to the Home tab in the query editor and press the Close & Load button to save the query and output the resulting data to a new sheet. This is a very quick way to reformat your data back to a more usable tabular format.



Deltares is een onafhankelijk kennisinstituut voor toegepast onderzoek op het gebied van water en ondergrond. Wereldwijd werken we aan slimme oplossingen voor mens, milieu en maatschappij.

Deltares

www.deltares.nl